

**Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Российский химико-технологический университет
имени Д.И. Менделеева»**

«УТВЕРЖДЕНО»

на заседании Ученого совета

РХТУ им. Д.И. Менделеева

протокол № 1 от «29» августа 2024 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

**«Современное технологическое и аппаратное оформление процессов
химической технологии»**

Направление подготовки 18.04.01 Химическая технология
(Код и наименование направления подготовки)

**Магистерская программа – «Химия и технология биологически
активных веществ»**
(Наименование магистерской программы)

Квалификация «магистр»

Москва 2024

Программа составлена: к.т.н., ассистентом кафедры химии и технологии органического синтеза Р.Р. Дашкиным

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры химии и технологии органического синтеза

«26» апреля 2024 г., протокол №7

1. ЦЕЛЬ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ

Программа составлена в соответствии с требованиями Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования – магистратура по направлению подготовки **18.04.01 Химическая технология** (ФГОС ВО), рекомендациями Методической комиссии и накопленным опытом преподавания дисциплины кафедрой **Химии и технологии органического синтеза** РХТУ им. Д.И. Менделеева. Программа рассчитана на изучение дисциплины в течение одного семестра.

Дисциплина **«Современное технологическое и аппаратное оформление процессов химической технологии»** относится к обязательной части дисциплин учебного плана. Программа дисциплины предполагает, что обучающиеся имеют теоретическую и практическую подготовку по дисциплинам «Физическая химия», «Процессы и аппараты химической технологии», но главным образом в дисциплинах «Основы проектирования производств биологически активных веществ».

Цель дисциплины – повышение научно-технической и методологической компетенций магистранта, необходимых для решения профессиональных задач, связанных с масштабированием химических процессов в области технологии получения биологически активных веществ; ознакомление с современным уровнем развития, тенденциями развития и проблемами науки и техники в области технологии получения продуктов тонкого органического синтеза.

Задачи дисциплины – передача студентам систематизированных знаний и практических навыков, позволяющих решать теоретические и практические задачи в технологии получения биологически активных веществ и подборе оборудования для данного типа производств;

– развитию у студентов профессиональных навыков для решения конкретных практических задач.

Дисциплина **«Современное технологическое и аппаратное оформление процессов химической технологии»** преподается в 1 семестре. Контроль успеваемости студентов ведется по принятой в университете рейтинговой системе.

Рабочая программа дисциплины может быть реализована с применением электронных образовательных технологий и электронного обучения полностью или частично.

2. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Изучение дисциплины направлено на приобретение следующих **компетенций и индикаторов их достижения**:

Общепрофессиональные компетенции и индикаторы их достижения:

Наименование категории (группы) ОПК	Код и наименование ОПК	Код и наименование индикатора достижения ОПК
Научные исследования и разработки	ОПК-3. Способен разрабатывать нормы выработки, технологические нормативы на расход материалов, заготовок, топлива и электроэнергии, контролировать параметры технологического процесса, выбирать оборудование и технологическую оснастку.	ОПК-3.1 Знает современные тенденции развития соответствующего направления химической промышленности. ОПК-3.2 Знает технологические основы организации современных химических производств соответствующего профиля. ОПК-3.3 Знает современные требования к аппаратному оформлению основных процессов соответствующего направления химической промышленности. ОПК-3.4 Знает конструкцию современного технологического оборудования соответствующего профиля. ОПК-3.5 Умеет составлять и анализировать современные технологические схемы основных процессов соответствующего профиля, а также их оптимизировать и наполнять передовым современным оборудованием. ОПК-3.6 Умеет выбирать оборудование для конкретных технологических процессов с учётом химических и физико-химических свойств перерабатываемых материалов. ОПК-3.7 Умеет находить нестандартные решения задач технологического и аппаратного оформления процессов химической технологии соответствующего профиля. ОПК-3.8 Умеет квалифицированно оценивать эффективность разрабатываемых и существующих химико-технологических процессов. ОПК-3.9 Умеет применять в профессиональной деятельности современные технологии и оборудование. ОПК-3.10 Владеет современными представлениями о передовых технологиях и оборудовании соответствующего направления химической промышленности. ОПК-3.11 Владеет навыками разработки современных инновационных химико-технологических процессов соответствующего профиля.

В результате изучения дисциплины студент магистратуры должен:

Знать:

- современные тенденции развития технологического и аппаратного оформления процессов производства биологически активных веществ;
- принципы выбора аппаратного оформления процессов в технологии биологически активных веществ;
- принципы и методы оптимизации оборудования при производстве биологически активных веществ;
- физико-химические основы современных и перспективных технологий биологически активных веществ.

Уметь:

- подбирать оборудование и анализировать технологические схемы основных процессов в технологии биологически активных веществ, а также оптимизировать и оценивать эффективность выбранного оборудования.
- рассчитывать, оценивать и находить оптимальное технологическое решение с требуемыми характеристиками для конкретных процессов в технологии биологически активных веществ

Владеть:

- методами оценки и расчета основного технологического оборудования производств биологически активных веществ;
- принципами разработки современного оборудования производств биологически активных веществ.

3. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Вид учебной работы	Объем дисциплины		
	ЗЕ	Акад. ч.	Астр. ч.
Общая трудоемкость дисциплины	3	108	81
Контактная работа – аудиторные занятия:	1,42	51	38,3
в том числе в форме практической подготовки	0,94	34	25,5
Лекции	0,47	17	12,8
Практические занятия (ПЗ)	0,94	34	25,5
в том числе в форме практической подготовки	0,94	34	25,5
Самостоятельная работа	0,58	21	15,7
Самостоятельное изучение разделов дисциплины		21	15,7
Вид контроля:			
Экзамен	1,0	36	27
Контактная работа – промежуточная аттестация	1,0	0,3	0,23
Подготовка к экзамену.		35,7	26,77
Вид итогового контроля:	Экзамен		

4. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

4.1. Разделы дисциплины и виды занятий

№ п/п	Раздел дисциплины	Академ. часов								
		Всего	в т.ч. в форме пр. подг.	Лекции	в т.ч. в форме пр. подг.	Прак. зан.	в т.ч. в форме пр. подг.	Лаб. работы	в т.ч. в форме пр. подг.	Сам. работа
	Введение. Основные понятия	4	-	3	-	-	-	-	-	1
1.	Раздел 1. Расчет параметров ёмкостного реакторного оборудования	21	12,5	3,5	-	12,5	12,5	-	-	5
1.1	Критерии подобия при расчёте реакторного оборудования.	5,5	4	0,5	-	4	4	-	-	1
1.2	Влияние конструкции реактора на вводимую мощность при перемешивании.	4,5	2,5	1	-	2,5	2,5	-	-	1
1.3	Влияние параметров реакторного оборудования на процесс теплообмена.	6	3	1	-	3	3	-	-	2
1.4	Оптимизация энергетических затрат на процесс в реакторном оборудовании.	5	3	1	-	3	3	-	-	1
2.	Раздел 2. Реактора для гетерофазных процессов в синтезе биологически активных веществ	35	17,5	7,5	-	17,5	17,5	-	-	10
2.1	Реактора для проведения процессов газ-жидкость.	12	6	3	-	6	6	-	-	3
2.2	Реактора для проведения процессов газ- жидкость-твёрдое вещество	10	5	2	-	5	5	-	-	3
2.3	Газозахватывающие мешалки.	13	6,5	2,5	-	6,5	6,5	-	-	4

3	Раздел 3. Оборудование для процессов выделения и очистки продуктов тонкой химии	12	4	3	-	4	4	-	-	5
3.1	Периодическая препаративная хроматография	2,5	1	0,5	-	1	1	-	-	1
3.2	Непрерывная препаративная хроматография	2	0,5	0,5	-	0,5	0,5	-	-	1
3.3	Расчет оборудования для процесса фильтрации	7,5	2,5	2	-	2,5	2,5	-	-	3
	ИТОГО	72	34	17	-	34	34	-	-	21
	Экзамен	36	-	-	-	0,4	-	-	-	35,6
	ИТОГО	108	-	-	-	-	-	-	-	-

4.2 Содержание разделов дисциплины

Введение. Основные понятия

Что такое тонкая химия. История мирового рынка. Специфика используемого оборудования

Раздел 1. Расчет параметров ёмкостного реакторного оборудования

Критерии подобия при расчёте реакторного оборудования. Подobie геометрическое и динамическое. Критерий Рейнольдса, Фруда в ёмкостном оборудовании. Критерий мощности. Теоретические основы критерия мощности.

Влияние конструкции реактора на вводимую мощность при перемешивании. Характерное время перемешивания и минимальное время на перемешивание при гомогенизации. Оптимизация энергетических затрат на процесс в реакторном оборудовании. Зависимости вводимой энергии на перемешивание и на теплообмен.

Влияние параметров реакторного оборудования на процесс теплообмена. Коэффициент теплопередачи в реакторе с перемешивающим устройством. Коэффициент теплоотдачи в реакторе и рубашке.

Раздел 2. Реактора для гетерофазных процессов в синтезе биологически активных веществ

Реактора для проведения процессов газ-жидкость. Плёночная теория и массоперенос в реакторе. Комбинирование скорости реакции и массопереноса.

Реактора для проведения процессов газ-жидкость-твёрдое вещество. Плёночная и диффузионная теория и массоперенос в реакторе. Расчёт коэффициента массопередачи. Комбинирование скорости реакции и массопереноса.

Газозахватывающие мешалки. Принцип работы. Область применимости. Достоинства и недостатки.

Раздел 3. Оборудование для процессов выделения и очистки продуктов тонкой химии

Препаративная хроматография, как метод выделения биологически активных веществ в промышленности. Методы расчёта и подбора хроматографических систем. Периодическая препаративная хроматография, организация процесса и расчёт. Непрерывная препаративная хроматография, организация процесса и расчёт.

Фильтрация. Фильтрование и центрифугирование. Методы фильтрации. Масштабирование процесса фильтрации. Подбор и сравнение оборудования.

5. СООТВЕТСТВИЕ СОДЕРЖАНИЯ ТРЕБОВАНИЙ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

№	В результате освоения дисциплины студент должен:		Раздел 1	Раздел 2	Раздел 3
	Знать:				
1.	– современные тенденции развития технологического и аппаратного оформления процессов производства биологически активных веществ;		+	+	+
2.	– принципы выбора аппаратного оформления процессов в технологии биологически активных веществ;		+	+	+
3.	– принципы и методы оптимизации оборудования на производстве биологически активных веществ;		+	+	+
4.	– физико-химические основы современных и перспективных технологий биологически активных веществ.		+	+	+
	Уметь:				
5.	– подбирать оборудование и анализировать технологические схемы основных процессов в технологии биологически активных веществ, а также оптимизировать и оценивать эффективность выбранного оборудования.		+	+	+
6.	– рассчитывать, оценивать и находить оптимальное технологическое решение с требуемыми характеристиками для конкретных процессов в технологии биологически активных веществ		+	+	+
	Владеть:				
7.	– методами оценки и расчета основного технологического оборудования производств биологически активных веществ;		+		+
8.	– принципами разработки современного оборудования производств биологически активных веществ.		+	+	+
	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК			
9.	– ОПК-3. Способен разрабатывать нормы	– ОПК-3.1 Знает современные тенденции развития соответствующего направления химической промышленности.	+	+	+
10.	выработки, технологические нормативы на расход	– ОПК-3.2 Знает технологические основы организации современных химических производств соответствующего профиля.	+	+	+

11.	материалов, заготовок, топлива и электроэнергии,	– ОПК-3.3 Знает современные требования к аппаратному оформлению основных процессов соответствующего направления химической промышленности.	+	+	+
12.	контролировать параметры технологического процесса, выбирать оборудование и технологическую оснастку.	– ОПК-3.4 Знает конструкцию современного технологического оборудования соответствующего профиля.	+	+	+
13.		– ОПК-3.5 Умеет составлять и анализировать современные технологические схемы основных процессов соответствующего профиля, а также их оптимизировать и наполнять передовым современным оборудованием.	+	+	+
14.		– ОПК-3.6 Умеет выбирать оборудование для конкретных технологических процессов с учётом химических и физико-химических свойств перерабатываемых материалов.	+	+	+
15.		– ОПК-3.7 Умеет находить нестандартные решения задач технологического и аппаратного оформления процессов химической технологии соответствующего профиля.	+	+	+
16.		– ОПК-3.8 Умеет квалифицированно оценивать эффективность разрабатываемых и существующих химико-технологических процессов.	+	+	+
17.		– ОПК-3.9 Умеет применять в профессиональной деятельности современные технологии и оборудование.	+	+	+
18.		– ОПК-3.10 Владеет современными представлениями о передовых технологиях и оборудовании соответствующего направления химической промышленности.	+	+	+
19.		– ОПК-3.11 Владеет навыками разработки современных инновационных химико-технологических процессов соответствующего профиля.	+	+	+

6. ПРАКТИЧЕСКИЕ И ЛАБОРАТОРНЫЕ ЗАНЯТИЯ

6.1. Практические занятия

Примерные темы практических занятий по дисциплине.

№ п/п	№ раздела дисциплины	Темы практических занятий	Часы
1.	1	Расчёт критерия мощности в емкостном реакторном оборудовании	4
2.		Расчёт характерного времени перемешивания в реакторном оборудовании. Оптимизация энергетических затрат в реакторном оборудовании.	5,5
3.		Расчёт коэффициентов теплоотдачи в реакторном оборудовании	3
4.	2	Расчёт скорости течения процесса в реакторах для проведения процесса газ-жидкость. Расчёт скорости течения процесса в реакторах для проведения процесса газ-жидкость-твёрдое вещество	11
5.		Подбор газозахватывающих перемешивающих устройств.	6,5
6.	3	Подбор оборудования и хроматографической системы для препаративного разделения биологически активных веществ.	1,5
7.		Расчёт и подбор оборудования для процесса фильтрации.	2,5
		Итого:	34

6.2 Лабораторные занятия

Выполнение лабораторного практикума учебным планом дисциплины *«Современное технологическое и аппаратное оформление процессов химической технологии»* не предусмотрено.

7. САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА

Самостоятельная работа проводится с целью углубления знаний по дисциплине и предусматривает:

- регулярную проработку пройденного на лекциях и практических занятиях учебного материала;
- подготовку к контрольным работам по материалу лекционного курса;
- работа с рекомендованной учебной и научной литературой, работу с электронно-библиотечными системами, включая переводы публикаций из научных журналов, цитируемых в базах Scopus, Web of Science, Chemical Abstracts, РИНЦ;
- подготовку к сдаче экзамена по дисциплине.

Планирование времени на самостоятельную работу, необходимого на изучение дисциплины, студентам лучше всего осуществлять на весь период изучения, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала. Материал, законспектированный на лекциях, необходимо регулярно дополнять сведениями из литературных источников, представленных в рабочей программе. При работе с указанными источниками рекомендуется составлять краткий конспект материала, с обязательным фиксированием библиографических данных источника.

8. ПРИМЕРЫ ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ КОНТРОЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Совокупная оценка по дисциплине складывается из оценок за выполнение контрольных работ (максимальная оценка 60 баллов) и итогового контроля в форме экзамена (максимальная оценка 40 баллов).

8.1. Примерная тематика реферативно-аналитической работы.

Выполнение реферативно-аналитической работы учебным планом дисциплины *«Современное технологическое и аппаратурное оформление процессов химической технологии»* не предусмотрено.

8.2. Примеры контрольных вопросов для текущего контроля освоения дисциплины

Для текущего контроля предусмотрено 3 контрольные работы. Максимальная оценка за контрольные работы №1, №2 и №3 (1 семестр) составляет по 20, 25 и 15 баллов за каждую.

Раздел	Контрольные вопросы
Раздел 1 Расчет параметров емкостного реакторного оборудования	1. Критерии подобия при расчёте реакторного оборудования. 2. Подобие геометрическое и динамическое. 3. Критерий Рейнольдса, Фруда в емкостном оборудовании. 4. Критерий мощности, вывод уравнения. 5. Теоретические основы критерия мощности. 6. Влияние конструкции реактора на вводимую мощность при перемешивании. 7. Характерное время перемешивания 8. Минимальное время на перемешивание при гомогенизации. 9. Влияние параметров реакторного оборудования на процесс теплообмена. 10. Расчёт коэффициента теплопередачи в реакторе с перемешивающим устройством. 11. Расчёт коэффициента теплоотдачи в реакторе и рубашке. 12. Оптимизация энергетических затрат на процесс в реакторном оборудовании. 13. Зависимости вводимой энергии на перемешивание и на теплообмен.
Раздел 2 Реактора для гетерофазных процессов в синтезе биологически активных веществ	1. Промышленный реактора для проведения процессов газ-жидкость. 2. Плёночная теория и массоперенос в реакторе. 3. Расчёт скорости протекания процесса в реакторе газ-жидкость. 4. Реактора для проведения процессов газ-жидкость-твёрдое вещество. 5. Плёночная и диффузионная теория и массоперенос в реакторе. 6. Расчёт коэффициента массопередачи в реакторе газ-жидкость-твёрдое вещество. 7. Расчёт скорости протекания процесса в реакторе газ-жидкость-твёрдое вещество. 8. Принцип работы газозахватывающих мешалок. 9. Область применимости газозахватывающих мешалок. 10. Достоинства и недостатки газозахватывающих мешалок.
Раздел 3. Методы	1. Препаративная хроматография, как метод выделения биологически активных веществ

выделения и очистки продуктов тонкой химии	2. Расчёт и подбор периодических хроматографических систем, организация процесса 3. Непрерывная препаративная хроматография. 4. Теория фильтрования. 5. Сравнение фильтрации и центрифугирования. 6. Масштабирование процессов фильтрации 7. Расчёт, подбор и сравнение оборудования для фильтрации.

Раздел 1. Примеры вопросов к контрольной работе № 1. Максимальная оценка – 20 баллов. Контрольная работа содержит 1 вопрос, по 20 баллов за вопрос.

Вариант 1

Определите число модулей в КМ статическом смесителе диаметром 8 м. Среда аналогичная по свойствам воде с расходом 0,9 м³/ч (плотность 1000 кг/м³, вязкость 1сПз). Какая мощность требуется для осуществления перекачивания через данный смеситель. Шероховатость внутренней поверхности труб составляет 40 мкм.

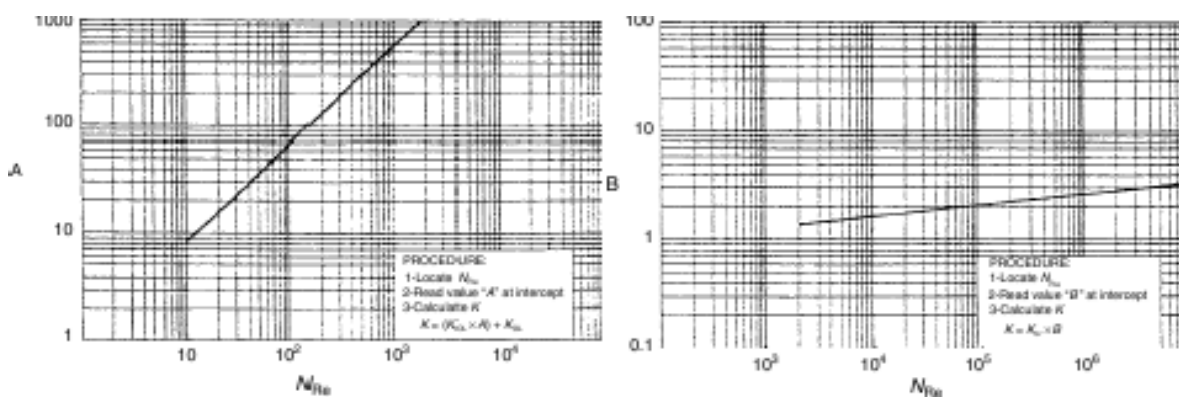


Диаграмма для $10 < Re < 2000$. $K = (K_{OL} * A) + K_{OL}$ $Re > 2000$. $K = K_{OL} * B$

TABLE 7-21 The Correct Number of Kenics Mixer Modules for Blending Applications

N_{Re} (Based on empty pipe)	Standard Modules Required
< 10	4
10 to 1,000	3
1,000 to 2,000	2
> 2,000	1

Раздел 2. Примеры вопросов к контрольной работе № 2. Максимальная оценка – 25 баллов. Контрольная работа содержит 3 вопроса, по 10, 7 и 8 баллов за вопрос, соответственно.

Вариант 1

В реакторе с диаметром 1м и высотой столба жидкости 1 м с газозахватывающей мешалкой PBTD с диаметром 0,3м со статором в сочетании с расположенной ниже на 300 мм пропеллерной мешалкой с восходящим потоком, находящейся на расстоянии в 300 мм от дна реактора, проходит реакция гидрирования анилина до циклогексиламина при 130 °С, при данной температуре константа скорости на единицу объёма катализатора равняется 90 с-1. Реакцию считать псевдопервого порядка по водороду.

Соотношение объёма катализатора к объёму жидкой фазы в реакторе составляет 0,05. Размер частиц катализатора - 1,0 мм;

Размер пузырьков газа – 0,8 мм;
 Эффективный коэффициент диффузии в порах катализатора – $1,9 \cdot 10^{-9} \text{ м}^2/\text{с}$;
 Коэффициент массопереноса водорода на границе жидкость/твёрдое – $2,2 \cdot 10^{-3} \text{ м/с}$;
 Коэффициент массопереноса водорода в пленке жидкости – $1,7 \cdot 10^{-5} \text{ м/с}$;
 Константа Генри – $2240 \text{ бар} \cdot \text{м}^3/\text{кмоль}$;
 Плотность жидкой фазы – 700 кг/м^3 ;
 Плотность водорода – $0,09 \text{ кг/м}^3$;
 Вязкость жидкой фазы – $10^{-3} \text{ Па} \cdot \text{с}$;
 Критерий мощности – 5;
 Давление газа в реакторе – 50 бар.

1. Рассчитать мощность, затрачиваемую на перемешивание при скорости вращения мешалки $N_{CG} \cdot 1,1$, $N_{CG} \cdot 2$, $N_{CG} \cdot 3$. (учитывать среднюю плотность реакционной массы за счёт газа, без учёта твёрдых частиц).
2. Рассчитать требуемый для проведения реакции расход водорода и расход водорода через газозахватывающую мешалку при данных числах оборотов. Рассчитать мощность рециклового компрессора взамен газозахватывающей.
3. Рассчитать мощность рециклового компрессора взамен газозахватывающей мешалки, при условии сохранения гидродинамических параметров в реакторе. Перепад давления при рецикле составит 1 бар. Расчёт мощности проводить по следующей формуле

$$P_{\text{комп}} = P_1 \cdot Q_{\text{H}_2} \cdot \frac{k}{k-1} \cdot \left(\left(\frac{P_2}{P_1} \right)^{\frac{k-1}{k}} - 1 \right) / \eta$$

$\eta = 0,75$, $k=1,4$, P_1 – входное давление, P_2 – выходное давление.

Сравнить энергозатраты при использовании газозахватывающей мешалки и рециклового компрессора.

Раздел 3. Примеры вопросов к контрольной работе № 3. Максимальная оценка – 15 баллов. Контрольная работа содержит 2 вопроса, по 7 и 8 баллов за вопрос, соответственно.

Вариант 1

1. SMB хроматография. Описать виды, схемы и принцип работы.
2. Сравнение процессов фильтрации при помощи избыточного давления и центрифугирования. Критические факторы процесса влияющие на подбор оборудования.

8.3. Вопросы для итогового контроля освоения дисциплины (1 семестр – экзамен).

Экзаменационный билет включает контрольные вопросы по разделам 1, 2 и 3 рабочей программы дисциплины и содержит 2 вопроса.

1 вопрос – 20 баллов, вопрос 2 – 20 баллов.

8.3.1. Примеры контрольных вопросов для итогового контроля освоения дисциплины (1 семестр – экзамен).

Примеры теоретических вопросов:

1. Производства малотоннажной химии. Особенности производств. Рынок.
2. Критерии подобия при расчёте реакторного оборудования. Теоретические основы критерия мощности.
3. Влияние конструкции реактора на вводимую мощность при перемешивании. Характерное время перемешивания и минимальное время на перемешивание при гомогенизации.
4. Влияние параметров реакторного оборудования на процесс теплообмена.

5. Реактора для проведения процессов газ-жидкость. Плёночная теория и массоперенос в реакторе. Комбинирование скорости реакции и массопереноса.
6. Реактора для проведения процессов газ-жидкость-твёрдое вещество. Пленочная и диффузионная теория и массоперенос в реакторе. Расчет коэффициента массопередачи. Комбинирование скорости реакции и массопереноса.
7. Теория фильтрования. Фильтрация и центрифугирование. Особенности. Сравнение. Масштабирование. Выбор оборудования.
8. Препаративная хроматография. Основы метода. Область применимости. Периодическое и непрерывное исполнение.

Пример экзаменационной задачи:

Вариант 1

1. Критерии выбора и область применимости проточных смесителей.
2. Расчёт и подбор хроматографических систем, организация процесса.
3. В реакторе с турбинной мешалкой и рубашкой происходит непрерывный процесс окисления о-ксилола кислородом воздуха до о-метилбензойной кислоты. В реактор с постоянным расходом вводится свежий о-ксилол и отбирается раствор продукта в о-ксилоле. Концентрация продукта в выходящем потоке составляет 20 мол. %. Т.к. концентрация ксилола изменяется не сильно, то реакцию можно считать псевдопервого порядка по кислороду. Константа скорости равняется $1,05 \text{ с}^{-1}$ при 160°C и 10 атм (при данных условиях проходит процесс). Расход воздуха составляет $360 \text{ м}^3/\text{ч}$.

Параметры реактора:

- объём реактора..... $3,2 \text{ м}^3$,
- диаметр реактора..... $1,6 \text{ м}$,
- диаметр мешалки..... 500 мм ,
- высота уровня жидкости $1,6 \text{ м}$,
- диаметр рубашки..... $1,8 \text{ м}$,
- толщина стенки реактора и рубашки 8 мм ,
- теплопроводность материала стенки $17,8 \text{ Вт/м}^\circ\text{К}$,
- критерий мощности мешалки..... $5,0$,
- число оборотов мешалки..... 180 об/мин ,
- КПД муфты $0,97$,
- КПД двигателя $0,95$.

Параметры реакционной массы:

- удерживаемый объём газа ε_g $0,3$,
- коэффициент Генри $127 \text{ м}^3\cdot\text{атм/кмо}$
- коэффициент диффузии $1,4\cdot 10^{-9} \text{ м}^2/\text{с}$,
- коэффициент массопереноса в жидкости k_L $4,1\cdot 10^{-4} \text{ м/с}$,
- средний диаметр пузырьков $1,2 \text{ мм}$,
- плотность ксилола
(жидкой составляющей реакционной массы)..... 880 кг/м^3 ,
- плотность воздуха $1,25 \text{ кг/м}^3$,
- теплопроводность ксилола (160°C)..... $0,11 \text{ Вт/м}^\circ\text{К}$,
- вязкость ксилола (160°C)..... $0,345 \text{ мПа}\cdot\text{с}$,
- теплоёмкость ксилола $1721 \text{ Дж/кг}\cdot\text{К}$,
- начальная температура ксилола..... 20°C ,
- теплота реакции образования о-метилбензойной кислоты..... 149 кДж/моль .

Параметры теплоносителя:

- температура начальная 120 °С,
- температура конечная 125 °С,
- плотность теплоносителя (123 °С) 980 кг/м³,
- теплопроводность теплоносителя (123 °С) 0,167 Вт/м*К,
- вязкость теплоносителя (123 °С) 5 мПа*с,
- теплоёмкость теплоносителя (123 °С) 1500 Дж/кг*К.

Задание:

1. Рассчитать мощность привода перемешивающего устройства (5 баллов).
2. Рассчитать производительность реактора по продукту в кмоль/ч (5 баллов).
3. Рассчитать коэффициент теплопередачи в текущих условиях проведения процесса (5 баллов).
4. Рассчитать требуемый коэффициент теплопередачи для съёма тепла, образуемого в ходе реакции и, если потребуется, предложить способы увеличения К (5 баллов).

Значения параметров, если расчёт не получился на промежуточных этапах:

1. Доля непрореагировавшего кислорода $f_n = 0,16$.

Фонд оценочных средств приведен в виде отдельного документа, являющегося неотъемлемой частью основной образовательной программы.

8.4. Структура и примеры билетов для экзамена (1 семестр).

Экзамен по дисциплине «Современное технологическое и аппаратурное оформление процессов химической технологии» проводится в 1 семестре и включает контрольные вопросы по разделам 1-3 рабочей программы дисциплины. Билет для **экзамена** состоит из 2 вопросов, относящихся к указанным разделам.

Пример билета для **экзамена**:

«Утверждаю» _____ (Должность, наименование кафедры) _____ С.В. Попков (Подпись) (И. О. Фамилия) «__» _____ 20__ г.	Министерство науки и высшего образования РФ
	Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева
	Кафедра химии и технологии органического синтеза
	18.04.01 Химическая технология Магистерская программа – «Химия и технология биологически активных веществ»
	Современное технологическое и аппаратурное оформление процессов химической технологии
Билет № 1 1. Влияние параметров реакторного оборудования на процесс теплообмена. 2. В реакторе с турбинной мешалкой и рубашкой происходит непрерывный процесс окисления о-ксилола кислородом воздуха до о-метилбензойной кислоты. В реактор с постоянным расходом вводится свежий о-ксилол и отбирается раствор продукта в о-ксилоле. Концентрация продукта в выходящем потоке составляет 20 мол. %. Т.к. концентрация ксилола изменяется не сильно, то реакцию можно считать псевдопервого порядка по кислороду. Константа скорости равняется 1,05 с⁻¹ при 160 °С и 10 атм (при данных условиях проходит процесс). Расход воздуха составляет 360	

м³/ч.

Параметры реактора:

- объём реактора..... 3,2 м³,
- диаметр реактора..... 1,6 м,
- диаметр мешалки..... 500 мм,
- высота уровня жидкости..... 1,6 м,
- диаметр рубашки..... 1,8 м,
- толщина стенки реактора и рубашки 8 мм,
- теплопроводность материала стенки 17,8 Вт/м*К,
- критерий мощности мешалки..... 5,0,
- число оборотов мешалки..... 180 об/мин,
- КПД муфты 0,97,
- КПД двигателя 0,95.

Параметры реакционной массы:

- удерживаемый объём газа ε_g 0,3,
- коэффициент Генри 127
м³*атм/кмо
- коэффициент диффузии $1,4 \cdot 10^{-9}$ м²/с,
- коэффициент массопереноса в жидкости k_L $4,1 \cdot 10^{-4}$ м/с,
- средний диаметр пузырьков..... 1,2 мм,
- плотность ксилола
(жидкой составляющей реакционной массы)..... 880 кг/м³,
- плотность воздуха..... 1,25 кг/м³,
- теплопроводность ксилола (160 °С)..... 0,11 Вт/м*К,
- вязкость ксилола (160 °С)..... 0,345 мПа*с,
- теплоёмкость ксилола 1721
Дж/кг*К,
- начальная температура ксилола..... 20 °С,
- теплота реакции образования о-метилбензойной кислоты..... 149
кДж/моль.

Параметры теплоносителя:

- температура начальная..... 120 °С,
- температура конечная 125 °С,
- плотность теплоносителя (123 °С) 980 кг/м³,
- теплопроводность теплоносителя (123 °С)..... 0,167
Вт/м*К,
- вязкость теплоносителя (123 °С) 5 мПа*с,
- теплоёмкость теплоносителя (123 °С) 1500
Дж/кг*К.

Задание:

1. Рассчитать мощность привода перемешивающего устройства (**5 баллов**).
2. Рассчитать производительность реактора по продукту в кмоль/ч (**5 баллов**).
5. Рассчитать коэффициент теплопередачи в текущих условиях проведения процесса (**5 баллов**).
6. Рассчитать требуемый коэффициент теплопередачи для съёма тепла, образуемого в ходе реакции и, если потребуется, предложить способы увеличения К (**5 баллов**).

Значения параметров, если расчёт не получился на промежуточных этапах:

1. Доля непрореагировавшего кислорода $f_n = 0,16$.

9. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

9.1. Рекомендуемая литература

А. Основная литература

1. Комиссаров, Ю. А. Процессы и аппараты химической технологии/ Ю. А. Комиссаров, Л. С. Гордеев, Д. П. Вент. - М.: Химия, 2011. – 1229 с.
2. Баранов Д.А. Процессы и аппараты химической технологии/ Баранов Д.А., — Санкт-Петербург: Лань, 2016. — 408 с.
3. Химическая технология лекарственных веществ. Основные процессы химического синтеза биологически активных веществ [Электронный ресурс] : учебное пособие / А.А. Иозеп [и др.] ; под ред. Иозеп А.А.. — Электрон. дан. — Санкт-Петербург : Лань, 2017. — 356 с.

Б. Дополнительная литература

1. Мельников Н.Н. Пестициды. Химия, технология и применение. / Н.Н. Мельников // М.: Химия, 1987. - 712 с.

9.2. Рекомендуемые источники научно-технической информации

- Раздаточный иллюстративный материал к лекциям.
- Презентации к лекциям.

Научно-технические журналы:

- «Химико-фармацевтический журнал» ISSN 0023-1134
- Журнал «Кинетика и катализ» ISSN 0453-8811
- Журнал «Химическая промышленность сегодня» ISSN 0023-110X
- Журнал «Фармацевтическая промышленность»

Ресурсы информационно–телекоммуникационной сети Интернет (*при необходимости*):

- <https://gmpnews.ru/>
- <http://www.remedium.ru/>

9.3. Средства обеспечения освоения дисциплины

Для реализации рабочей программы подготовлены следующие средства обеспечения освоения дисциплины:

- компьютерные презентации интерактивных лекций – по 3 разделам дисциплины, (общее число слайдов – 486);

Для реализации учебной программы с использованием электронного обучения (ЭО) и дистанционных образовательных технологий (ДОТ) применяются следующие образовательные технологии и средства обеспечения дисциплины:

- ЕИОС РХТУ им. Д.И. Менделеева;
- платформы для проведения онлайн конференций (Zoom, Skype и др.);
- сервисы по доставки e-mail сообщений.

Для проведения промежуточных и итоговой аттестации могут использоваться такие сервисы как: Яндекс.Формы, Zoom, Skype, отдельные специализированные модули LMS.

10. ПЕРЕЧЕНЬ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ В ОБРАЗОВАТЕЛЬНОМ ПРОЦЕССЕ

Информационную поддержку изучения дисциплины осуществляет Информационно-библиотечный центр (ИБЦ) РХТУ им. Д.И. Менделеева, который обеспечивает обучающихся основной учебной, учебно-методической и научной

литературой, необходимой для организации образовательного процесса по дисциплине. Общий объем многоотраслевого фонда ИБЦ на 01.01.2024 составляет 1 559 436 экз.

Фонд ИБЦ располагает учебной, учебно-методической и научно-технической литературой в форме печатных и электронных изданий, а также включает официальные, справочно-библиографические, специализированные отечественные и зарубежные периодические и информационные издания. ИБЦ обеспечивает доступ к профессиональным базам данных, информационным, справочным и поисковым системам.

Каждый обучающийся обеспечен свободным доступом из любой точки, в которой имеется доступ к сети Интернет и к электронно-библиотечной системе (ЭБС) Университета, которая содержит различные издания по основным изучаемым дисциплинам и сформирована по согласованию с правообладателями учебной и учебно-методической литературы.

Для более полного и оперативного справочно-библиографического и информационного обслуживания в ИБЦ реализована технология Электронной доставки документов.

Полный перечень электронных информационных ресурсов, используемых в процессе обучения, представлен в основной образовательной программе.

11. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

В соответствии с учебным планом занятия по дисциплине *«Современное технологическое и аппаратное оформление процессов химической технологии»* проводятся в форме лекций, практических и самостоятельной работы обучающегося.

11.1. Оборудование, необходимое в образовательном процессе:

Лекционная учебная аудитория, оборудованная электронными средствами демонстрации (компьютер со средствами звуковоспроизведения, проектор, экран) и учебной мебелью.

Библиотека, имеющая рабочие места, оснащенные компьютерами с доступом к базам данных и выходом в Интернет.

11.2. Учебно-наглядные пособия:

Учебные пособия по дисциплине.

Раздаточный материал к разделам дисциплины.

Раздаточный материал к практическим занятиям по дисциплине. Электронные презентации к разделам дисциплины.

Справочные материалы в печатном и электронном виде.

11.3. Компьютеры, информационно-телекоммуникационные сети, аппаратно-программные и аудиовизуальные средства:

Персональные компьютеры, укомплектованные проигрывателями CD и DVD, принтерами и программными средствами.

Пректоры и экраны.

Копировальные аппараты.

Локальная сеть с выходом в Интернет.

Мультимедийный проектор в комплекте с ноутбуком, Оверхед проектор Medium 524 Р 3-х линзовый.

11.4. Печатные и электронные образовательные и информационные ресурсы:

Информационно-методические материалы: учебные пособия по дисциплине; раздаточный материал к разделам лекционного курса; альбомы и рекламные проспекты с основными видами и характеристиками полимерных материалов.

11.5. Перечень лицензионного программного обеспечения:

Полный перечень лицензионного программного обеспечения представлен в основной образовательной программе.

№ п.п.	Наименование программного продукта	Реквизиты договора поставки	Срок окончания действия лицензии
1.	WINDOWS 8.1 Professional Get Genuine	Контракт № 62-64ЭА/2013 от 02.12.2013	бессрочно
2.	Micosoft Office Standard 2013	Контракт № 62-64ЭА/2013 от 02.12.2013	бессрочная
3.	WINHOME 10 Russian OLV NL Each AcademicEdition	Контракт № 28-35ЭА/2020 от 26.05.2020	бессрочно
4.	Microsoft Office Standard 2019 В составе: • Word • Excel • Power Point • Outlook	Контракт №175- 262ЭА/2019 от 30.12.2019	12 месяцев (ежегодное продление подписки с правом перехода на обновлённую версию продукта)
5.	Kaspersky Endpoint Security для бизнеса – Стандартный Russian Edition.	Договор № 99-155ЭА-223/2024	12 месяцев (ежегодное продление подписки с правом перехода на обновлённую версию продукта)

12. ТРЕБОВАНИЯ К ОЦЕНКЕ КАЧЕСТВА ОСВОЕНИЯ ПРОГРАММЫ

Наименование разделов	Основные показатели оценки	Формы и методы контроля и оценки
Раздел 1. Расчет параметров ёмкостного реакторного оборудования	<i>Знать:</i> –современные тенденции развития технологии биологически активных веществ; –принципы выбора аппаратурного оформления процессов в технологии биологически активных веществ; –принципы и методы оптимизации процессов в технологии биологически активных веществ; –физико-химические основы современных и перспективных технологий биологически активных веществ; <i>Уметь:</i> –составлять и анализировать технологические схемы основных процессов в технологии биологически активных веществ, а также оптимизировать и оценивать их эффективность. –рассчитывать, оценивать и находить оптимальное технологическое решение с требуемыми характеристиками для конкретных процессов в технологии биологически активных веществ <i>Владеть:</i> –методами оценки и расчета основного технологического оборудования производств биологически активных веществ; –принципами разработки современного оборудования производств биологически активных веществ.	Оценка за контрольную работу №1 (1 семестр) Оценка за экзамен (1 семестр)
Раздел 2. Реактора для гетерофазных процессов в синтезе биологически активных веществ	<i>Знать:</i> –современные тенденции развития технологии биологически активных веществ; –принципы выбора аппаратурного оформления процессов в технологии биологически активных веществ; –принципы и методы оптимизации процессов в технологии биологически активных веществ; –физико-химические основы современных и перспективных технологий биологически активных веществ; <i>Уметь:</i> –составлять и анализировать технологические схемы основных процессов в технологии биологически активных веществ, а также оптимизировать и оценивать их эффективность. –рассчитывать, оценивать и находить оптимальное технологическое решение с требуемыми характеристиками для конкретных процессов в технологии биологически активных веществ	Оценка за контрольную работу №2 (1 семестр) Оценка за экзамен (1 семестр)

	<i>Владеть:</i> – методами оценки и расчета основного технологического оборудования производств биологически активных веществ; – принципами разработки современного оборудования производств биологически активных веществ.	
Раздел 3. Методы выделения и очистки продуктов тонкой химии	<i>Знать:</i> – современные тенденции развития технологии биологически активных веществ; – принципы выбора аппаратного оформления процессов в технологии биологически активных веществ; – принципы и методы оптимизации процессов в технологии биологически активных веществ; – физико-химические основы современных и перспективных технологий биологически активных веществ; <i>Уметь:</i> – составлять и анализировать технологические схемы основных процессов в технологии биологически активных веществ, а также оптимизировать и оценивать их эффективность. – рассчитывать, оценивать и находить оптимальное технологическое решение с требуемыми характеристиками для конкретных процессов в технологии биологически активных веществ <i>Владеть:</i> – методами оценки и расчета основного технологического оборудования производств биологически активных веществ; – принципами разработки современного оборудования производств биологически активных веществ.	Оценка за Контрольную работу №3 (1 семестр) Оценка за экзамен (1 семестр)

13. ОСОБЕННОСТИ ОРГАНИЗАЦИИ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО ПРОЦЕССА ДЛЯ ИНВАЛИДОВ И ЛИЦ С ОГРАНИЧЕННЫМИ ВОЗМОЖНОСТЯМИ ЗДОРОВЬЯ

Обучение инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья осуществляется в соответствии с:

- Порядком организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры (Приказ Министерства науки и высшего образования Российской Федерации от 06.04.2021 № 245);

- Положением о порядке организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева», принятым решением Ученого совета РХТУ им. Д.И. Менделеева от 28.12.2022, протокол № 5;

- Методическими рекомендациями по организации образовательного процесса для обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья в образовательных организациях высшего образования, в том числе оснащенности образовательного процесса (утверждены заместителем Министра образования и науки РФ А.А. Климовым от 08.04.2014 № АК-44/05вн).

**Дополнения и изменения к рабочей программе дисциплины
«Современное технологическое и аппаратурное оформление
процессов химической технологии»**

основной образовательной программы

Направление подготовки 18.04.01 – Химическая технология
Магистерская программа «Химия и технология биологически активных веществ»

Форма обучения: очная

Номер изменения/ дополнения	Содержание дополнения/изменения	Основание внесения изменения/дополнения
1.		протокол заседания Ученого совета № _____ от « ____ » _____ 20__ г.
		протокол заседания Ученого совета № _____ от « ____ » _____ 20__ г.
		протокол заседания Ученого совета № _____ от « ____ » _____ 20__ г.
		протокол заседания Ученого совета № _____ от « ____ » _____ 20__ г.
		протокол заседания Ученого совета № _____ от « ____ » _____ 20__ г.

**Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Российский химико-технологический университет
имени Д.И. Менделеева»**

«УТВЕРЖДЕНО»
на заседании Ученого совета
РХТУ им. Д.И. Менделеева
протокол № 1 от «29» августа 2024 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

«Инструментальные методы исследования в химической технологии»

Направление подготовки 18.04.01 Химическая технология

**Магистерская программа:
«Химия и технология биологически активных веществ»**

Квалификация «магистр»

Москва 2024

Программа составлена на кафедре Химии и технологии биомедицинских препаратов.
Авторы программы: к.х.н., доцент Ермоленко Ю.В., д.х.н., профессор Кочетков К.А.,
к.х.н., ассистент Ткаченко С.В., доц. А.Г. Поливанова.

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры Химии и технологии биомедицинских препаратов «16» апреля 2024 г., протокол №7.

1. ЦЕЛЬ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ

Программа составлена в соответствии с требованиями Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования – магистратура по направлению подготовки **18.04.01 Химическая технология** (ФГОС ВО), рекомендациями Методической комиссии и накопленным опытом преподавания дисциплины кафедрой Химии и технологии биомедицинских препаратов РХТУ им. Д.И. Менделеева. Программа рассчитана на изучение дисциплины в течение одного семестра.

Дисциплина «Инструментальные методы исследования в химической технологии» относится к базовой части дисциплин учебного плана. Программа дисциплины предполагает, что обучающиеся имеют теоретическую и практическую подготовку в области аналитической, физической и коллоидной химии, а также знакомы с основными современными инструментальными методами анализа органических веществ.

Цель дисциплины – формирование у обучающихся систематизированных знаний о современных методах физико-химического анализа, применяемых при синтезе, разработке и производстве биологически активных веществ, повышение профессиональных компетенций в области проведения физико-химического анализа, получение навыков в интерпретации результатов исследований, проведенных на современных приборах физико-химического анализа.

Задачи дисциплины:

- формирование у обучающихся системных углубленных знаний в области анализа органических веществ;

- формирование у обучающихся профессиональных навыков необходимых для самостоятельного решения прикладных задач в области анализа биологически активных веществ в процессе выполнения научно-исследовательских работ.

Дисциплина «Инструментальные методы исследования в химической технологии» преподается в 1 семестре. Контроль успеваемости студентов ведется по принятой в университете рейтинговой системе.

Рабочая программа дисциплины может быть реализована с применением электронных образовательных технологий и электронного обучения полностью или частично.

2. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Изучение дисциплины направлено на приобретение следующих **компетенций и индикаторов их достижения:**

Общепрофессиональные компетенции и индикаторы их достижения:

Наименование категории (группы) ОПК	Код и наименование ОПК	Код и наименование индикатора достижения ОПК
Научные исследования и разработки	ОПК-1. Способен организовывать самостоятельную и коллективную научно-исследовательскую работу, разрабатывать планы и программы проведения	ОПК-1.4. Умеет использовать методы научного исследования при решении научных задач; ОПК-1.5 Умеет формулировать и представлять результаты научного исследования; ОПК-1.6 Владеет методами научного

	научных исследований и технических разработок.	исследования;
Профессиональная Методология	ОПК-2. Способен использовать современные приборы и методики, организовывать проведение экспериментов и испытаний, проводить их обработку и анализировать их результаты для решения производственных и научных задач.	ОПК-2.1. Знает теорию физико-химических методов анализа; ОПК-2.2. Знает принципы работы основных приборов в инструментальных методах химического анализа; ОПК-2.3. Знает методы целенаправленного сбора и анализа научной литературы; ОПК-2.4. Умеет применять приобретенные практические навыки в профессиональной деятельности для решения конкретных задач; ОПК-2.5. Умеет анализировать научную литературу с целью выбора направления исследования по заданной теме; ОПК-2.6. Владеет идеологией и системой выбора инструментальных методов химического анализа, а также оценкой возможностей каждого метода; ОПК-2.7. Владеет метрологическими основами инструментальных методов анализа; ОПК-2.8. Владеет способами обработки полученных результатов и анализа их с учетом имеющихся литературных данных.

В результате изучения дисциплины студент магистратуры должен:

Знать:

- теоретические принципы, лежащие в основе газовой хроматографии, хромато-масс-спектрометрии, ИК-, УФ и ЯМР- спектроскопии;
- классификацию и механизм действия детекторов, применяемых в ГЖХ и ЖХ, типы колонок в ГЖХ и ЖХ;
- области применения хроматографических анализов при исследовании БАВ;
- основные положения теории колебательной спектроскопии, виды колебательных спектров, происхождение колебательных спектров, аналитические возможности колебательной спектроскопии;
- явление взаимодействия магнитных полей с веществом и способ измерений этого взаимодействия;
- основные параметры спектров ЯМР и причины, обуславливающие их вариации;
- технологию решения прямых и обратных спектральных задач применительно к ЯМР, включая двумерную спектроскопию, основы интерпретации спектров ЯМР.

Уметь:

- интерпретировать данные, полученные методами ГЖХ, ЖХ, ИК, УФ и ЯМР спектроскопии;
- определять основные хроматографические параметры из полученных хроматограмм разделенной смеси;
- выявлять характеристические полосы поглощения различных структурных и функциональных групп в органических соединениях; идентифицировать органические соединения по ИК-спектрам;
- решать прямые спектральные задачи;
- определять число и относительную интенсивность всех сигналов в спектрах ЯМР ^1H и ^{13}C , устанавливать химические сдвиги для сигналов атома углерода и атома водорода.

Владеть:

- знаниями о теории современных методов анализа биологически активных веществ;
- практическими навыками, необходимыми для решения прикладных задач в области инструментального анализа;
- знаниями о теории современных методов анализа биологически активных веществ.

3. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Вид учебной работы	Объем дисциплины		
	ЗЕ	Акад. ч.	Астр.ч.
Общая трудоемкость дисциплины	4	144	108
Контактная работа – аудиторные занятия:	1,89	68	51
Лекции	0,44	16	12
Лабораторные занятия	0,95	34	25,5
в том числе в форме практической подготовки	0,95	34	25,5
Практические занятия	0,5	18	13,5
в том числе в форме практической подготовки	0,5	18	13,5
Самостоятельная работа	2,11	76	57
Контактная самостоятельная работа	2,11	0,4	0,3
Самостоятельное изучение разделов дисциплины		75,6	56,7
Вид итогового контроля:	Зачет с оценкой		

4. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ
4.1. Разделы дисциплины и виды занятий

№ п/п	Раздел дисциплины	Академ. часов							
		Всего	в т.ч. в форме пр. подг.	Лекции	Прак. зан.	в т.ч. в форме пр. подг.	Лаб. работы	в т.ч. в форме пр. подг.	Сам. работа
1.	Раздел 1. Применение спектрометрических методов элементного и молекулярного анализа биологически активных веществ	52	18	8	8	8	10	10	26
1.1	Введение. Химические, биологические и инструментальные методы хирального анализа биологически активных веществ.	21	4	4	4	4	-	-	13
1.2	Атомная и молекулярная спектрометрия, методы ядерного магнитного резонанса, масс-спектрометрия.	31	14	4	4	4	10	10	13
2.	Раздел 2. Применение хроматографических методов анализа биологически активных веществ.	50	18	6	6	6	12	12	26
2.1	Газовая хроматография и прочие хроматографические методы	17	2	2	2	2	-	-	13
2.2	Высокоэффективная жидкостная хроматография	33	16	4	4	4	12	12	13
3.	Раздел 3. Применение электрохимических методов анализа биологически активных веществ.	44	16	4	4	4	12	12	24
3.1	Капиллярный электрофорез	28	8	2	2	2	12	12	12
3.2	Классические электрохимические методы анализа биологически активных веществ	16	2	2	2	2	-	-	12
	ИТОГО	144	52	16	18	18	34	34	76
	Вид итогового контроля	Зачет с оценкой							

4.2 Содержание разделов дисциплины

Раздел 1. Применение спектрометрических методов элементного и молекулярного анализа биологически активных веществ. Введение. Спектрометрические методы элементного анализа. Атомно-эмиссионный и атомно-абсорбционный анализ. Масс-спектрометрия неорганических веществ (масс-спектрометрия с индуктивно связанной плазмой). Приборное обеспечение. Современные достижения методов атомного анализа. Применение методов в фармацевтическом и экологическом анализе: определение тяжелых металлов и примесей неорганической природы.

Спектрометрические методы молекулярного анализа. Спектрометрия в видимой и ультрафиолетовой областях: абсорбционная и эмиссионная спектроскопия. Аналитическая информация, получаемая из УФ/видимого диапазона. Современное приборное обеспечение. Область решаемых задач при синтезе и производстве биологически активных веществ. Использование методов для научных исследований (определение стехиометрии реакций, констант кислотности/комплексобразования, установление межмолекулярных взаимодействий различной природы).

Инфракрасная и романовская спектроскопия. Аспекты практического применения методов в анализе и научных исследованиях.

Спектроскопия ядерного магнитного резонанса. Сущность метода ЯМР: краткая история метода, его возможности, особенности, ограничения. Возможности и перспективы применения метода для анализа органических соединений, природного сырья и биомолекул. Теоретические основы метода. Спин ядра, ориентация ядерного спина в магнитном поле. Магнитные ядра в магнитном поле, расщепление энергии. Условие резонанса и его экспериментальное обнаружение. Константа экранирования, абсолютный и относительный химический сдвиги. Эталоны, развертка по полю и по частоте. Зависимость химического сдвига от B_0 . Влияние на химический сдвиг гибридизации атома углерода и электронных эффектов заместителей, температуры, концентрации, кислотности среды, растворителя. Спин-спиновое взаимодействие. Мультиплетность сигналов ЯМР. Константы спин-спинового взаимодействия (KCCB): прямые, геминальные, вицинальные и дальние константы, их знак и свойства. Спиновые системы, спектры первого и высших порядков. Ядерный эффект Оверхаузера. Способы упрощения спектров, двойной резонанс, подавление спин-спинового взаимодействия. Динамические эффекты в спектроскопии ЯМР.

Понятие о многомерной спектроскопии ЯМР. Двумерная спектроскопия ЯМР. Гомоядерная протон-протонная. Гетероядерная. Гомоядерные Н-Н корреляции COSY, TOCSY. Спектроскопия ЯМР с использованием ядерного эффекта Оверхаузера – методики NOESY, ROESY. Гетероядерные Н-С корреляции. $^1\text{H} - ^{13}\text{C}$ корреляции HSQC, HMQC, HMBC. Обменная спектроскопия EXSY. Спектроскопия DOSY. Применение комбинации одномерных и двумерных методик для анализа строения молекул органических веществ. Аналитическая масс-спектрометрия. Задачи, решаемые с использованием масс-спектрометрических датчиков в гибридных методах анализа.

Важность анализа стереохимических особенностей веществ для фармакологии и химико-фармацевтических производств. Биологическая важность понятия о хиральности. Хиральность в природе. Примеры различной биологической активности *S*- и *R*-соединений. Причины различия в поведении энантиомерных молекул по отношению к симметричным реагентам и к хиральным молекулам. Связь стереохимического строения с биологической активностью.

Ахиральные и хиральные молекулы, число стереомеров. Энантиомерные и диастереомерные соотношения, особенности их анализа. Различия и сходства в химических и физических свойствах энантиомеров и диастереомеров. Мезо-формы. Оптическая чистота, энантиомерный избыток. Рацемизация, эпимеризация. Активность рацематов, талидомид.

Основные химические методы анализа хиральных биологически активных веществ. Биологические методы анализа оптически активных веществ. Удельное оптическое вращение, дисперсия оптического вращения. Основные методы определения энантиомерного состава. Относительные и абсолютные методы. Спектры дисперсии оптического вращения, кругового дихроизма и их ограничения. Методы ЯМР-спектроскопии (хиральные производные и добавки, хиральные растворители, комплексообразование с хиральными сдвигающими реагентами). Метод рентгеноструктурного анализа и его особенности.

Раздел 2. Применение хроматографических методов анализа биологически активных веществ. Введение. Газовая хроматография. Фазы, используемые в газовой хроматографии. Область решаемых задач. Высокоэффективная жидкостная хроматография: адсорбционная, ионная, гелепроникающая. Область решаемых задач. Возможности хроматографических методов, связанные с использованием различных датчиков: масс-спектрометрические, флуориметрические, вискозиметрические, рефрактометрические, детекторы светорассеяния. Основные характеристики детектора вне зависимости от принципа действия: дрейф базовой линии, шум базовой линии, предел детектирования, область линейного отклика. Применение методов для анализа биологически активных веществ. Вопросы пробоподготовки для различных хроматографических методов. Задачи, решаемые методом в фармацевтическом, экологическом анализе и контроле производства биологически активных веществ. Применение методов для биофармацевтического анализа. Определение молекулярных масс полимеров. Определение неорганических анионов и катионов в сырье и продукции производства биологически активных веществ. Современное приборное обеспечение. Ультразэффективная жидкостная хроматография. Преимущества. Области применения. Возможности ГЖХ и ВЭЖХ на хиральных колонках для анализа стереомеров биологически активных веществ. Автоматические анализаторы на базе хроматографов. Автоматические CNHS/O анализаторы на базе газовых хроматографов. Автоматические аминокислотные анализаторы.

Раздел 3. Применение электрохимических методов анализа биологически активных веществ. Применение классических методов электрохимического анализа для качественных и количественных определений биологически активных веществ: потенциометрия, кондуктометрия, вольтамперометрия, кулонометрия. Примеры использования методов в анализе биологически активных веществ. Определение воды по Фишеру кулонометрическим и амперометрическим титрованием. Автоматические титраторы, использующие электрохимические методы. Автоматические анализаторы на базе электрохимических методов. Использование классических электрохимических методов для научных исследований. Примеры.

Капиллярный электрофорез. Физико-химические основы метода. Процессы, происходящие в капилляре под действием приложенного электрического поля. Принцип разделения частиц в капилляре. Электрофорез и электромиграция в капилляре. Электроосмотический поток. Профиль электроосмотического потока. Факторы, влияющие на электромиграцию частицы. Основные термины и понятия, принятые в методе. Устранение и обращение электроосмотического потока. Способы детектирования сигнала в капиллярном электрофорезе. Принципиальная блок-схема метода. Прием косвенного детектирования при использовании спектрофотометрического детектора. Качественный и количественный анализ. Эффективность, селективность и чувствительность метода. Способы их представления. Метод хирального электрофореза и его современные возможности. Сравнительная характеристика методов КЭ и ВЭЖХ. Основные разновидности метода. Зонный капиллярный электрофорез. Мицеллярная электрокинетическая хроматография. Афинный капиллярный электрофорез. Капиллярный гель-электрофорез. Капиллярное изоэлектрическое фокусирование. Аппаратурное оформление метода. Применение метода для решения научных и прикладных задач.

5. СООТВЕТСТВИЕ СОДЕРЖАНИЯ ТРЕБОВАНИЙ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

№	В результате освоения дисциплины студент должен:	Раздел 1	Раздел 2	Раздел 3
	Знать:			
1	– теоретические принципы, лежащие в основе газовой хроматографии, хромато-масс-спектрометрии, ИК-, УФ и ЯМР- спектроскопии;	+		
2	– классификацию и механизм действия детекторов, применяемых в ГЖХ и ЖХ, типы колонок в ГЖХ и ЖХ;		+	
3	– области применения хроматографических анализов при исследовании БАВ;		+	
4	– основные положения теории колебательной спектроскопии, виды колебательных спектров, происхождение колебательных спектров, аналитические возможности колебательной спектроскопии;	+		
5	– явление взаимодействия магнитных полей с веществом и способ измерений этого взаимодействия;	+		
6	– основные параметры спектров ЯМР и причины, обуславливающие их вариации;	+		
7	– технологию решения прямых и обратных спектральных задач применительно к ЯМР, включая двумерную спектроскопию, основы интерпретации спектров ЯМР.	+		
	Уметь:			
8	– интерпретировать данные, полученные методами ГЖХ, ЖХ, ИК, УФ и ЯМР спектроскопии;	+	+	
9	– определять основные хроматографические параметры из полученных хромато-грамм разделенной смеси;		+	
10	– выявлять характеристические полосы поглощения различных структурных и функциональных групп в органическом соединений; идентифицировать органические соединения по ИК-спектрам;	+		
11	– решать прямые спектральные задачи;	+		
12	– определять число и относительную интенсивность всех сигналов в спектрах ЯМР ^1H и ^{13}C , устанавливать химические сдвиги для сигналов атома углерода и атома водорода	+		
	Владеть:			
13	– знаниями о теории современных методов анализа биологически активных веществ;	+	+	+

14	– практическими навыками, необходимыми для решения прикладных задач в области инструментального анализа;		+	+	+
15	– знаниями о теории современных методов анализа биологически активных веществ;		+	+	+
В результате освоения дисциплины студент должен приобрести следующие <i>общепрофессиональные компетенции и индикаторы их достижения:</i>					
	Код и наименование ОПК	Код и наименование индикатора достижения ОПК			
16	ОПК-1. Способен организовывать самостоятельную и коллективную научно-исследовательскую работу, разрабатывать планы и программы проведения научных исследований и технических разработок.	ОПК-1.4. Умеет использовать методы научного исследования при решении научных задач;	+	+	+
		ОПК-1.5 Умеет формулировать и представлять результаты научного исследования;	+	+	+
		ОПК-1.6 Владеет методами научного исследования;	+	+	+
17	ОПК-2. Способен использовать современные приборы и методики, организовывать проведение экспериментов и испытаний, проводить их обработку и анализировать их результаты для решения производственных и научных задач.	ОПК-2.1. Знает теорию физико-химических методов анализа;	+	+	+
		ОПК-2.2. Знает принципы работы основных приборов в инструментальных методах химического анализа;	+	+	+
		ОПК-2.3. Знает методы целенаправленного сбора и анализа научной литературы;	+	+	+
		ОПК-2.4. Умеет применять приобретенные практические навыки в профессиональной деятельности для решения конкретных задач;	+	+	+
		ОПК-2.5. Умеет анализировать научную литературу с целью выбора направления исследования по заданной теме;	+	+	+
		ОПК-2.6. Владеет идеологией и системой выбора инструментальных методов химического анализа, а также оценкой возможностей каждого метода;	+	+	+
		ОПК-2.7. Владеет метрологическими основами инструментальных методов анализа;	+	+	+
		ОПК-2.8. Владеет способами обработки полученных результатов и анализа их с учетом имеющихся литературных данных.	+	+	+

6. ПРАКТИЧЕСКИЕ И ЛАБОРАТОРНЫЕ ЗАНЯТИЯ

6.1. Практические занятия

Примерные темы практических занятий по дисциплине.

№ п/п	№ раздела дисциплины	Темы практических занятий	Часы
1	1	Использование методов молекулярной спектроскопии для научных исследований (определение стехиометрии реакций, констант кислотности/комплексообразования, установление межмолекулярных взаимодействий различной природы).	2
2		Инфракрасная и романовская спектроскопия. Аспекты практического применения методов в анализе и научных исследованиях.	2
3		Спектроскопия ЯМР и возможности метода в анализе органических соединений. Применение одномерной ЯМР-спектроскопии для идентификации органических молекул в индивидуальном виде. Спектроскопия на ядрах ^1H , ^{13}C , ^{31}P , ^{19}F .	2
4		Применение двумерной ЯМР-спектроскопии для идентификации органических молекул в индивидуальном виде. Спектроскопия на ядрах ^1H , ^{13}C . Основные методики двумерной гомо- и гетероядерной спектроскопии COSY, TOCSY, NOESY, ROESY, HSQC, HMQC, HMBC.	1
5		Применение двумерной ЯМР-спектроскопии для идентификации органических молекул в индивидуальном виде. Спектроскопия DOSY. Комбинация одномерных и двумерных методик для анализа структуры молекул органических веществ в растворе.	1
6	2	Применение методов для анализа биологически активных веществ. Задачи, решаемые методом в фармацевтическом, экологическом анализе и контроле производства биологически активных веществ.	2
7		Основные характеристики детектора вне зависимости от принципа действия: дрейф базовой линии, шум базовой линии, предел детектирования, область линейного отклика.	2
8		Современные приборное обеспечение ВЭЖХ. Ультраэффективная жидкостная хроматография. Преимущества. Области применения. Автоматические CNHS/O анализаторы на базе газовых хроматографов. Автоматические аминокислотные анализаторы.	1
9		Применение геляпроникающей ВЭЖХ. Определение молекулярных масс полимеров.	1

10	3	Определение воды по Фишеру кулонометрическим и амперометрическим титрованием. Автоматические титраторы. Использование методов для научных исследований.	1
11		Определение константы кислотности салициловой кислоты методом потенциометрического титрования.	1
12		Способы детектирования сигнала в капиллярном электрофорезе. Принципиальная блок-схема метода. Прием косвенного детектирования при использовании спектрофотометрического детектора.	1
13		Основные разновидности метода капиллярного электрофореза. Зонный капиллярный электрофорез. Мицеллярная электрокинетическая хроматография. Аффинный капиллярный электрофорез. Капиллярный гель-электрофорез. Капиллярное изоэлектрическое фокусирование.	1

6.2 Лабораторные занятия

Выполнение лабораторного практикума способствует закреплению материала, изучаемого в дисциплине «Инструментальные методы исследования в химической технологии», а также дает знания о технике выполнения анализа при реализации различных физико-химических методов и навыки практической работы в лабораториях физико-химических методов анализа биологически активных веществ.

Максимальное количество баллов за выполнение лабораторного практикума составляет 27 баллов (максимально по 3 балла за каждую работу). Количество работ и баллов за каждую работу может быть изменено в зависимости от их трудоемкости.

Примеры лабораторных работ и разделы, которые они охватывают

№ п/п	№ раздела дисциплины	Наименование лабораторных работ	Часы
1	1	1. Спектрофотометрическое определение антибиотика. Изучение спектра поглощения. Количественный анализ. 2. Определение константы комплексообразования комплексного соединения спектрофотометрическим методом. 3. Определение константы кислотной диссоциации индикатора спектрофотометрическим методом.	10
2	2	4. Количественное определение антибиотика в составе лекарственной формы методом ВЭЖХ. 5. Работа на тренажере «Жидкостной хроматограф». Оптимизация методики ВЭЖХ для определения многокомпонентной смеси биологически активных веществ. Качественный и количественный анализ. 6. Определение ароматической кислоты (ароматического основания) в технологическом растворе методом ВЭЖХ.	12

3	3	7. Изучение влияния кислотности водного раствора на ионное состояние молекулы рифабутина методом капиллярного электрофореза. 8. Определение кофеина и теобромона в водном экстракте чая, кофе методом КЭФ. 9. Определение смеси алифатических органических кислот в их смеси методом капиллярного электрофореза с косвенным детектированием.	12

7. САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА

Самостоятельная работа проводится с целью углубления знаний по дисциплине и предусматривает:

- ознакомление и проработку рекомендованной литературы, работу с электронно-библиотечными системами, включая переводы публикаций из научных журналов, цитируемых в базах Scopus, Web of Science, Chemical Abstracts, РИНЦ;
- посещение отраслевых выставок и семинаров;
- участие в семинарах РХТУ им. И. Менделеева по тематике дисциплины;
- подготовку к выполнению контрольных работ по материалу лекционного курса;
- подготовку к лабораторному практикуму по дисциплине.

Планирование времени на самостоятельную работу, необходимого на изучение дисциплины, студентам лучше всего осуществлять на весь период изучения, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала. Материал, законспектированный на лекциях, необходимо регулярно дополнять сведениями из литературных источников, представленных в рабочей программе. При работе с указанными источниками рекомендуется составлять краткий конспект материала, с обязательным фиксированием библиографических данных источника.

8. ПРИМЕРЫ ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ КОНТРОЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Совокупная оценка по дисциплине складывается из оценок за выполнение реферата (максимальная оценка 13 баллов), контрольной работы (максимальная оценка 20 баллов), лабораторного практикума (максимальная оценка 27 баллов) и итогового контроля в форме зачета с оценкой (максимальная оценка 40 баллов).

8.1. Примерная тематика реферативно-аналитической работы.

- 1) Историческая важность определения удельного вращения оптически активных соединений и ограничения метода.
- 2) Метод определения дисперсии оптического вращения хиральных соединений и примеры его использования.
- 3) Метод кругового дихроизма в анализе БАВ
- 4) Использование хиральных сдвигающих реагентов в анализе веществ методом ЯМР.
- 5) Современные возможности использования хиральных растворителей в анализе БАВ
- 6) Биохимические методы анализа БАВ
- 7) Анализ примеров различной биологической активности S- и R-стереомеров лекарственных препаратов.
- 8) Анализ возможностей современных хиральных колонок для ВЭЖХ.
- 9) Анализ примеров влияния условий на степень разделения стереомеров БАВ методом хирального электрофореза.

- 10) История использования метода РСА в анализе оптически активных веществ.
- 11) ЯМР – томография. Визуализация внутренних органов посредством ЯМР и ее применения в медицине
- 12) Спиновые парамагнитные метки в методе ЭПР.
- 13) Исследование структуры ионных кристаллов методом ЭПР.
- 14) Применения ферромагнитного резонанса в СВЧ устройствах
- 15) История развития метода ЯМР.
- 16) Условия необходимые для экспериментального наблюдения ЯМР.
- 17) Измерения времен релаксации в методе ЯМР.
- 18) Связь ЯМР –релаксации и молекулярной диффузии.
- 19) Применение метода ЯМР для определения структуры белков.
- 20) ЯМР – томография и ее применения в медицине
- 21) Протонный магнитный резонанс (ПМР): химический сдвиг, спин –спиновое расщепление.
- 22) ЯМР-спектроскопия на ядрах атомов углерода и азота: основные сложности и пути решения.
- 23) Метод капиллярного электрофореза для анализа энантиомеров.
- 24) Анализ изоформ белков методом капиллярного электрофореза.
- 25) Изoeлектрическое фокусирование в методе капиллярного электрофореза для анализа белковых сред.
- 26) Электронная микроскопия как метод анализа наноструктур.
- 27) Электронная сканирующая микроскопия для анализа наноразмерных объектов органической природы.
- 28) Электронная трансмиссионная спектроскопия для анализа наноструктур.
- 29) Метод атомно-силовой микроскопии. Аспекты его практического применения.
- 30) Проточная цитометрия как метод анализа биологических объектов.
- 31) Метод двумерного электрофореза. Возможности метода для анализа белковых сред.
- 32) Особенности метода высокоэффективной жидкостной хроматографии для анализа смесей белков.
- 33) Высокоэффективная гельпроникающая хроматография. Возможности практического применения метода.
- 34) Методы анализа коллоидных сред.
- 35) Анализ размеров частиц на основе метода лазерной дифракции.
- 36) История развития метода капиллярного электрофореза.
Применение метода капиллярного электрофореза в российской и международных фармакопеех.

8.2. Примеры контрольных вопросов для текущего контроля освоения дисциплины

Для текущего контроля предусмотрена одна итоговая контрольная работа по всем разделам рабочей программы дисциплины. Максимальная оценка за итоговую контрольную работу составляет 20 баллов.

Примеры вопросов к итоговой контрольной работе. Контрольная работа содержит 3 вопроса, по 7, 7 и 6 баллов за 1-й, 2-й и 3-й вопрос соответственно.

Вопрос 1.1.

- 1) В камфоре содержатся 2 асимметрических центра при углеродных атомах, но известны только два её оптических изомера. Почему? Какими методами анализа их можно различить.
- 2) Сколько хиральных центров в обезболивающем препарате – норциметадоле? Какие инструментальные методы приемлемы для хирального анализа этого соединения.

- 3) Обладают ли структуры $\text{CH}_2=\text{C}=\text{CBr}_2$ и $\text{CHBr}=\text{C}=\text{C}=\text{CHBr}$ оптической активностью? Если да, изобразите их конфигурации.
- 4) Сколько хиральных центров в виноградном сахаре - глюкозе?
- 5) Можно ли выделить стереомеры 1,2-диметилциклопропана? Если да, то какие? Какими методами анализа их можно различить.
- 6) Можно ли ахиральные соединения считать рацемическими?
- 7) Чем отличаются (–)-молочная и α-оксипропионовая кислота - строением или конфигурацией? и как их отличить с помощью ферментов.
- 8) По каким свойствам отличаются энантиомеры? а) показатель преломления б) оптическое вращение в) реакционная способность по отношению к хиральным реагентам г) спектры ИК
- 9) Установите наличие или отсутствие хиральных атомов в молекуле: а) 1,1,2-триметилциклобутана б) 2-метилциклопентан-1-ол в) 1,1,3-триметилциклобутана г) 3-метилциклопентан-1-ол
- 10) По каким свойствам отличаются диастереомеры? а) дипольный момент б) свободная энергия в) реакционная способность по отношению к ахиральным реагентам г) спектры ЯМР
- 11) Изобразите формулу (+)-карвона. Какие инструментальные методы приемлемы для хирального анализа этого соединения.
- 12) В аминокислоте глицин протоны при группе CH_2 являются энантиотопными или гомотопными? Какой вид сигнала этих протонов в ЯМР-спектре?
- 13) В моноэфирмалоновой кислоты протоны при группе CH_2 являются энантиотопными или гомотопными? Какой вид сигнала этих протонов в ЯМР-спектре?
- 14) В аминокислоте фенилаланин протоны при группе CH_2 являются энантиотопными или диастереотопными? Какой вид сигнала этих протонов в ЯМР-спектре?
- 15) В аспарагиновой кислоте протоны в группе CH_2 являются энантиотопными или диастереотопными? Какой вид сигнала этих протонов в ЯМР-спектре?
- 16) В ЯМР-спектре одного из диастереомеров 2,6-диметилциклогексилбензилового эфира появляется квартет бензильных протонов. Какова конфигурация этого изомера?

Вопрос 1.2.

- 1) При анализе соединения методом ВЭЖХ к одному ммолью рацемического продукта добавили в качестве эталона 0.1 ммоль чистого (R)-энантиомера. Какова в результате должна быть энантиомерная чистота полученной смеси?
- 2) При анализе соединения методом ВЭЖХ к 0.5 ммолью рацемического продукта добавили в качестве эталона 0.5 ммоль чистого (S) -энантиомера. Какова в результате должна быть энантиомерная чистота полученной смеси?
- 3) На чем основано определение молекулярных масс белков методов высокоэффективной гельпроникающей хроматографии? Что в этом случае используются в качестве стандартов. Объясните принцип и тип используемых колонок и подвижных фаз.
- 4) На чем будет основано определение смеси аминокислот методом ВЭЖХ: фенилаланин, тирозин, триптофан. Предложите схему анализа.

Вопрос 1.3.

- 1) Предложите схему методики определения компонентов смеси методом капиллярного электрофореза: смесь фруктовых кислот: яблочная, лимонная, молочная, гликолевая.
- 2) На чем будет основано определение смеси аминокислот методом капиллярного зонного электрофореза: фенилаланин, тирозин, триптофан. Предложите схему анализа.
- 3) Предложите электрохимические методы анализа для определения содержания воды

в готовой лекарственной форме. Опишите суть определения для каждого из приведенных методов.

- 4) Объясните принцип определения константы кислотности слабой кислоты методом потенциометрического титрования. Приведите вид получающегося графика и опишите используемую для измерений электрохимическую ячейку.
- 5) Объясните принцип определения константы основности слабого основания методом потенциометрического титрования. Приведите вид получающегося графика и опишите используемую для измерений электрохимическую ячейку.

8.3. Вопросы для итогового контроля освоения дисциплины (1 семестр, зачет с оценкой)

Билет для зачета с оценкой включает контрольные вопросы по всем разделам рабочей программы дисциплины и содержит 4 вопроса, по 10 баллов за каждый. Максимальное количество баллов за зачет с оценкой – 40 баллов.

Примеры контрольных вопросов:

- 1) В камфоре содержатся 2 асимметрических центра при углеродных атомах, но известны только два её оптических изомера. Почему? Какими методами анализа их можно различить.
- 2) Сколько хиральных центров в обезболивающем препарате – норциметадоле? Какие инструментальные методы приемлемы для хирального анализа этого соединения.
- 3) Можно ли выделить стереомеры 1,2-диметилциклопропан а? Если да, то какие? Какими методами анализа их можно различить.
- 4) По каким свойствам отличаются энантиомеры? а) показатель преломления б) оптическое вращение в) реакционная способность по отношению к хиральным реагентам г) спектры ИК
- 5) Изобразите формулу (+)-карвона. Какие инструментальные методы приемлемы для хирального анализа этого соединения.
- 6) В моноэфирмалоновой кислоты протоны при группе CH_2 являются энантиотопными или гомотопными? Какой вид сигнала этих протонов в ЯМР-спектре?
- 7) В аминокислоте фенилаланин протоны при группе CH_2 являются энантиотопными или диастереотопными? Какой вид сигнала этих протонов в ЯМР-спектре?
- 8) В аспарагиновой кислоте протоны в группе CH_2 являются энантиотопными или диастереотопными? Какой вид сигнала этих протонов в ЯМР-спектре?
- 9) В ЯМР-спектре одного из диастереомеров 2,6-диметилциклогексилбензилового эфира появляется квартет бензильных протонов. Какова конфигурация этого изомера?
- 10) При анализе соединения методом ВЭЖХ к одному ммолью рацемического продукта добавили в качестве эталона 0.1 ммоль чистого (R)-энантиомера. Какова в результате должна быть энантиомерная чистота полученной смеси?
- 11) При анализе соединения методом ВЭЖХ к 0.5 ммолью рацемического продукта добавили в качестве эталона 0.5 ммоль чистого (S) -энантиомера. Какова в результате должна быть энантиомерная чистота полученной смеси?
- 12) Диэтиловый эфир винной кислоты – жидкость с удельным вращением $[\alpha]^{20}_{\text{D}} = +7,4^\circ$. В тех же условиях измерения образец, имеющий аналогичные физико-химические характеристики, но загрязненный другим энантиомером показал меньшее вращение $[\alpha]^{20}_{\text{D}} = +4,0^\circ$. Какова оптическая чистота данного образца? Каково процентное содержание каждого энантиомера в данном образце?
- 13) Предложите методы анализа и разделения на оптические изомеры для

- фторхлорбромметана и фторхлорбромметанола.
- 14) Принципиальная схема ЯМР-спектрометра: назначение, функции и требования, предъявляемые к его элементам. Магнит, датчик. Устройство современных спектрометров. Рабочие станции.
 - 15) Понятия ЯМР. Спин, спиновая система. Химический сдвиг и магнитная эквивалентность ядер. Правила симметрии.
 - 16) Спин-спиновое взаимодействие. Мультиплетность сигнала. Основные типы мультиплетов.
 - 17) Эквивалентное и неэквивалентное взаимодействие спинов. Правила спин-спинового взаимодействия.
 - 18) Виды ЯМР-спектроскопии. Импульсная спектроскопия. Схема обычного одномерного эксперимента.
 - 19) Импульсная спектроскопия. Виды и назначение РЧ импульсов. Релаксация, релаксационные процессы.
 - 20) Импульсная спектроскопия. Гетероядерная развязка. Релаксация. ЯЭО.
 - 21) Импульсная спектроскопия. Гетероядерный NOE. Природа и применение в ЯМР-спектроскопии.
 - 22) Принцип двумерной спектроскопии ЯМР. Виды и назначение двумерной спектроскопии ЯМР.
 - 23) Основные методики двумерной гомоядерной спектроскопии: COSY, TOCSY. Сущность методик, применение для анализа строения органических веществ.
 - 24) Основные методики двумерной спектроскопии с эффектом Оверхаузера NOESY, ROESY. Сущность методик, применение для анализа строения органических веществ.
 - 25) Основные методики двумерной гетероядерной спектроскопии, HSQC, HMQC, HMBC. Сущность методик, применение для анализа строения органических веществ.
 - 26) Предсказать ЯМР ^1H -спектр (мультиплетность, интегральную интенсивность и примерное положение сигнала в ppm для каждого протона) для 3-изобутилбензальдегида.
 - 27) Предсказать ЯМР ^1H -спектр (мультиплетность, интегральную интенсивность и примерное положение сигнала в ppm для каждого протона) для 3-(метоксиметил)-бензойной кислоты.
 - 28) Предсказать ЯМР ^1H -спектр (мультиплетность, интегральную интенсивность и примерное положение сигнала в ppm для каждого протона) для метил-(п-изопропилкетона).
 - 29) Предсказать ЯМР ^1H -спектр (мультиплетность, интегральную интенсивность и примерное положение сигнала в ppm для каждого протона) для изобутилацетата.
 - 30) Предсказать ЯМР ^1H -спектр (мультиплетность, интегральную интенсивность и примерное положение сигнала в ppm для каждого протона) для бутена-2.
 - 31) Предсказать ЯМР ^1H -спектр (мультиплетность, интегральную интенсивность и примерное положение сигнала в ppm для каждого протона) для 3-этил-4-диметиламинобензойной кислоты.
 - 32) Предложите схему методики определения компонентов смеси методом капиллярного электрофореза: смесь фруктовых кислот: яблочная, лимонная, молочная, гликолевая.
 - 33) На чем будет основано определение смеси аминокислот методом капиллярного зонного электрофореза: фенилаланин, тирозин, триптофан. Предложите схему анализа.
 - 34) На чем будет основано определение смеси аминокислот методом ВЭЖХ: фенилаланин, тирозин, триптофан. Предложите схему анализа.
 - 35) Предложите электрохимические методы анализа для определения содержания воды

в готовой лекарственной форме. Опишите суть определения для каждого из приведенных методов.

- 36) Объясните принцип определения константы кислотности слабой кислоты методом потенциометрического титрования. Приведите вид получающегося графика и опишите используемую для измерений электрохимическую ячейку.
- 37) Объясните принцип определения константы основности слабого основания методом потенциометрического титрования. Приведите вид получающегося графика и опишите используемую для измерений электрохимическую ячейку.
- 38) На чем основано определение молекулярных масс белков методами высокоэффективной гелипроникающей хроматографии? Что в этом случае используются в качестве стандартов. Объясните принцип и тип используемых колонок и подвижных фаз.

Фонд оценочных средств приведен в виде отдельного документа, являющегося неотъемлемой частью основной образовательной программы.

8.4. Структура и примеры билетов для зачета с оценкой

Зачет с оценкой по дисциплине «Инструментальные методы исследования в химической технологии» проводится в 1 семестре и включает контрольные вопросы по всем разделам рабочей программы дисциплины. Билет для зачета с оценкой состоит из 4-х вопросов, относящихся к указанным разделам.

Пример билета для зачета с оценкой:

<i>«Утверждаю» Зав. каф. ХТБМП М.С. Ощепков</i>	Министерство науки и высшего образования РФ
	Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева
	Кафедра химии и технологии биомедицинских препаратов
	Направление 18.04.01 Химическая технология, магистерская программа «Химия и технология биологически активных веществ»
	Дисциплина «Инструментальные методы исследования в химической технологии»
Билет № 1 1. На чем будет основано определение смеси аминокислот методом ВЭЖХ: фенилаланин, тирозин, триптофан. Предложите схему анализа. 2. Предложите методы анализа и разделения на оптические изомеры для фторхлорбромметана и фторхлорбромметанола. 3. Предскажите ЯМР ¹H-спектр (мультиплетность, интегральную интенсивность и примерное положение сигнала в ppm для каждого протона) для 3-(метоксиметил)-бензойной кислоты. 4. Объясните принцип определения константы кислотности слабой кислоты методом потенциометрического титрования. Приведите вид получающегося графика и опишите используемую для измерений электрохимическую ячейку	

9. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

9.1. Рекомендуемая литература

А. Основная литература

1. Петрухин О.М. (ред.). Аналитическая химия. Физические и физико-химические методы анализа. Учебник для вузов - М.: Химия, 2001. – 497 с. (Базовый учебник).
2. Поливанова А.Г. Высокоэффективная жидкостная хроматография биологически активных веществ. Лабораторный практикум: Учеб. пособие - М.: Издательство РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2013. - 55 с.
3. Винарский В.А. Юрченко Р.А. Коваленко А.Е., Кузовлев. В. Ю., Гладырев В.В. Масс- спектрометрия и хромато-масс-спектральный анализ: Учебное пособие. – М.: РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2013. - 143с
4. Воловенко Ю.М., Карцев В.Г., Комаров И.В., Туров А.В., Хиля В.П. Спектроскопия ядерного магнитного резонанса для химиков. «Научное Партнерство», 2011.
5. Ермоленко Ю.В., Калистратова А.В. Капиллярный электрофорез. Теоретические основы и практическое руководство. Лабораторный практикум: учебное пособие – М.: Издательство РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2021 г. – 128 с.

Б. Дополнительная литература

1. Гэри К. Аналитическая химия: в 2 т.: пер. с англ //М.: БИНОМ. Лаборатория знаний. – 2009. – Т. 1. – С. 623.
2. Сильверстейн Р, Вебстер Ф., Кимл Д., Спектрометрическая идентификация органических соединений / М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2012. - 557 с.
3. Лебедев А. Т. Масс-спектрометрия в органической химии. - М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, - 2003. - 493 с.
4. Пентин Ю. А., Курамшина Г. М. Основы молекулярной спектроскопии. – Мир, 2008.
5. Отто М. Современные методы аналитической химии (в 2-х томах). Учебник. – М.: Техносфера, 2008. – 544 с.
6. Кристиан Г. Аналитическая химия (в 2-х томах). Учебник. – М: Лаборатория знаний, 2013, том 1 - 623 с., том 2 - 504 с.

9.2. Рекомендуемые источники научно-технической информации

- Журнал аналитической химии. ISSN: 0044-4502
- Journal of Analytical Chemistry. ISSN: 0003-2700
- Journal of Chromatography A. ISSN: 0021-9673
- Journal of Mass Spectrometry ISSN: 1076-5174

10. ПЕРЕЧЕНЬ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ В ОБРАЗОВАТЕЛЬНОМ ПРОЦЕССЕ

Информационную поддержку изучения дисциплины осуществляет Информационно-библиотечный центр (ИБЦ) РХТУ им. Д.И. Менделеева, который обеспечивает обучающихся основной учебной, учебно-методической и научной

литературой, необходимой для организации образовательного процесса по дисциплине. Общий объем многоотраслевого фонда ИБЦ на 01.01.2024 г. составляет 1 559 436 экз.

Фонд ИБЦ располагает учебной, учебно-методической и научно-технической литературой в форме печатных и электронных изданий, а также включает официальные, справочно-библиографические, специализированные отечественные и зарубежные периодические и информационные издания. ИБЦ обеспечивает доступ к профессиональным базам данных, информационным, справочным и поисковым системам.

Каждый обучающийся обеспечен свободным доступом из любой точки, в которой имеется доступ к сети Интернет и к электронно-библиотечной системе (ЭБС) Университета, которая содержит различные издания по основным изучаемым дисциплинам и сформирована по согласованию с правообладателями учебной и учебно-методической литературы.

Для более полного и оперативного справочно-библиографического и информационного обслуживания в ИБЦ реализована технология Электронной доставки документов.

Полный перечень электронных информационных ресурсов, используемых в процессе обучения, представлен в основной образовательной программе.

11. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

В соответствии с учебным планом занятия по дисциплине «Инструментальные методы исследования в химической технологии» проводятся в форме лекций, практических занятий, лабораторных работ и самостоятельной работы обучающегося.

11.1. Оборудование, необходимое в образовательном процессе:

Лекционная учебная аудитория, оборудованная электронными средствами демонстрации (компьютер со средствами звуковоспроизведения, проектор, экран) и учебной мебелью; библиотека, имеющая рабочие компьютерные места для студентов, оснащенные компьютерами с доступом к базам данных и выходом в Интернет.

Лаборатория для проведения лабораторных работ, оборудованная, лабораторной мебелью, лабораторной посудой и следующим оборудованием:

- весы аналитические;
- спектрофотометр (УФ и видимая области спектра), CINTRA 101;
- фотоэлектроколориметр, КФК-3-0,1;
- жидкостные хроматографы микроколоночные с управляющими ноутбуками («МИЛИХРОМ А-02 – 2 шт., «АЛЬФАХРОМ» - 1 шт.);
- система капиллярного электрофореза «Капель-105М»;
- рН-метр с комбинированным стеклянным электродом, РСЕ-228;
- кондуктометр, Эконикс-Эксперт 002;
- настольная миницентрифуга, Eppendorf minispin.

11.2. Учебно-наглядные пособия:

Иллюстрации к разделам лекционного курса и практическим занятиям; графики и таблицы, иллюстрирующие лекционный материал, эталонные спектры и хроматограммы.

11.3. Компьютеры, информационно-телекоммуникационные сети, аппаратно-программные и аудиовизуальные средства:

Персональные компьютеры в аудитории для самостоятельной подготовки обучающихся, укомплектованные принтерами и программными средствами; проекторы и экраны; цифровые камеры; копировальные аппараты; локальная сеть с выходом в Интернет.

11.4. Печатные и электронные образовательные и информационные ресурсы:

Электронные образовательные ресурсы: электронные презентации к разделам лекционного курса; учебно-методические разработки в электронном виде; справочные материалы в печатном и электронном виде; кафедральная библиотека электронных изданий, выпускных квалификационных и диссертационных работ, выполненных аспирантами и сотрудниками кафедры.

11.5. Перечень лицензионного программного обеспечения:

№ п/п	Наименование программного продукта	Реквизиты договора поставки	Примечание	Срок окончания действия лицензии
1.	Microsoft Office Standard 2013	Контракт № 62-64ЭА/2013 от 02.12.2013	Лицензия на ПО, принимающее участие в образовательных процессах.	бессрочная
2.	Microsoft Office Professional Plus 2019 В составе: Word, Excel, Power Point, Outlook, OneNote, Access, Publisher, InfoPath	Контракт № 28-35ЭА/2020 от 26.05.2020	Лицензия на ПО, принимающее участие в образовательных процессах.	12 месяцев (ежегодное продление подписки с правом перехода на обновлённую версию продукта)
3.	Kaspersky Endpoint Security для бизнеса – Стандартный Russian Edition.	Контракт № 90-133ЭА/2021 от 07.09.2021	Лицензия на ПО, не принимающее прямого участия в образовательных процессах (инфраструктурное/вспомогательное ПО)	12 месяцев (ежегодное продление подписки с правом перехода на обновлённую версию продукта)
4.	«Антиплагиат.ВУЗ 5.0»	Контракт от 08.05.2024 №34-523К/2024	Лимит проверок 10 000	19.05.2025

12. ТРЕБОВАНИЯ К ОЦЕНКЕ КАЧЕСТВА ОСВОЕНИЯ ПРОГРАММЫ

Наименование разделов	Основные показатели оценки	Формы и методы контроля и оценки
Раздел 1. Применение спектрометрических методов элементного и молекулярного анализа биологически активных веществ	<i>Знает:</i> – теоретические принципы, лежащие в основе газовой хроматографии, хромато-масс-спектрометрии, ИК-, УФ и ЯМР-спектроскопии; – основные положения теории колебательной спектроскопии, виды колебательных спектров, происхождение колебательных спектров, аналитические возможности колебательной спектроскопии;	Оценка за лабораторную работу Оценка за реферат Оценка за контрольную работу Оценка за зачет

	– явление взаимодействия магнитных полей с веществом и способ измерений этого взаимодействия; – основные параметры спектров ЯМР и причины, обуславливающие их вариации; – технологию решения прямых и обратных спектральных задач применительно к ЯМР, включая двумерную спектроскопию, основы интерпретации спектров ЯМР. <i>Умеет:</i> – интерпретировать данные, полученные методами ГЖХ, ЖХ, ИК, УФ и ЯМР спектроскопии; – выявлять характеристические полосы поглощения различных структурных и функциональных групп в органическом соединений; идентифицировать органические соединения по ИК-спектрам; – решать прямые спектральные задачи; – определять число и относительную интенсивность всех сигналов в спектрах ЯМР ^1H и ^{13}C, устанавливать химические сдвиги для сигналов атома углерода и атома водорода. <i>Владеет:</i> – знаниями о теории современных методов анализа биологически активных веществ; – практическими навыками, необходимыми для решения прикладных задач в области инструментального анализа; знаниями о теории современных методов анализа биологически активных веществ.	
Раздел 2. Применение хроматографических методов анализа биологически активных веществ.	<i>Знает:</i> – теоретические принципы, лежащие в основе газовой хроматографии, хромато-масс-спектрометрии, ИК-, УФ и ЯМР-спектроскопии; – классификацию и механизм действия детекторов, применяемых в ГЖХ и ЖХ, типы колонок в ГЖХ и ЖХ;	Оценка за лабораторную работу Оценка за реферат Оценка за контрольную работу Оценка за зачет

	– области применения хроматографических анализов при исследовании БАВ; <i>Умеет:</i> – интерпретировать данные, полученные методами ГЖХ, ЖХ, ИК, УФ и ЯМР спектроскопии; – определять основные хроматографические параметры из полученных хромато-грамм разделенной смеси; <i>Владеет:</i> – знаниями о теории современных методов анализа биологически активных веществ; – практическими навыками, необходимыми для решения прикладных задач в области инструментального анализа; знаниями о теории современных методов анализа биологически активных веществ.	
Раздел 3. Применение электрохимических методов анализа биологически активных веществ.	<i>Владеет:</i> – знаниями о теории современных методов анализа биологически активных веществ; – практическими навыками, необходимыми для решения прикладных задач в области инструментального анализа; знаниями о теории современных методов анализа биологически активных веществ.	Оценка за лабораторную работу Оценка за реферат Оценка за контрольную работу Оценка за зачет

13. ОСОБЕННОСТИ ОРГАНИЗАЦИИ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО ПРОЦЕССА ДЛЯ ИНВАЛИДОВ И ЛИЦ С ОГРАНИЧЕННЫМИ ВОЗМОЖНОСТЯМИ ЗДОРОВЬЯ

Обучение инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья осуществляется в соответствии с:

– Порядком организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры (Приказ Министерства науки и высшего образования Российской Федерации от 06.04.2021 № 245);

– Положением о порядке организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева», принятым решением Ученого совета РХТУ им. Д.И. Менделеева от 28.12.2022, протокол № 5;

– Методическими рекомендациями по организации образовательного процесса для обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья в

образовательных организациях высшего образования, в том числе оснащенности образовательного процесса (утверждены заместителем Министра образования и науки РФ А.А. Климовым от 08.04.2014 № АК-44/05вн).

**Дополнения и изменения к рабочей программе дисциплины
«Инструментальные методы исследования в химической технологии»**

**основной образовательной программы
по направлению подготовки 18.04.01 Химическая технология,
магистерская программа – «Химия и технология биологически активных веществ»**

Форма обучения: **очная**

Номер изменения/ дополнения	Содержание дополнения/изменения	Основание внесения изменения/дополнения
1.		протокол заседания Ученого совета №_____от «___»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «___»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «___»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «___»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «___»_____20__г.

**Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Российский химико-технологический университет
имени Д.И. Менделеева»**

«УТВЕРЖДЕНО»
на заседании Ученого совета
РХТУ им. Д.И. Менделеева
протокол № 1 от «29» августа 2024 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

«Медицинская химия. Основы фармакологии»

Направление подготовки 18.04.01 Химическая технология

**Магистерская программа:
«Химия и технология биологически активных веществ»**

Квалификация «магистр»

Москва 2024

Программа составлена на кафедре Химии и технологии биомедицинских препаратов.
Авторы программы: к.х.н., доц. Крыщенко Ю.К., к.х.н., доц. Поливанова А.Г.

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры Химии и технологии биомедицинских препаратов «16» апреля 2024 г., протокол №7.

1. ЦЕЛЬ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ

Программа составлена в соответствии с требованиями Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования – магистратура по направлению подготовки **18.04.01 Химическая технология** (ФГОС ВО), рекомендациями Методической комиссии и накопленным опытом преподавания дисциплины кафедрой Химии и технологии биомедицинских препаратов РХТУ им. Д.И. Менделеева. Программа рассчитана на изучение дисциплины в течение одного семестра.

Дисциплина «Медицинская химия. Основы фармакологии» относится к общей части дисциплин учебного плана, формируемой участниками образовательных отношений. Программа дисциплины предполагает, что обучающиеся имеют теоретическую и практическую подготовку в области общей, неорганической и органической химии, биохимии, а также в области химии биологически активных веществ.

Цель дисциплины – научить студентов разбираться в основах фармакологии и структурного дизайна физиологически активных веществ, то есть видеть взаимосвязь между химической структурой и физиологической активностью, а также решать обратную задачу «структура – свойство» – конструировать необходимые структуры, обладающие заданным свойством.

Задачи дисциплины:

- рассмотрение фармакодинамики препаратов, а именно, взаимодействия с рецепторными системами, краткая характеристика таких систем и некоторых нейромедиаторов;
- изучение вопросов физиологии и патологической биохимии человека, касающихся рассматриваемых в рамках дисциплины классов лекарственных препаратов;
- ознакомление с принципами разработки лекарственных средств.

Дисциплина «Медицинская химия. Основы фармакологии» преподается в 3-м семестре. Контроль успеваемости студентов ведется по принятой в университете рейтинговой системе.

Рабочая программа дисциплины может быть реализована с применением электронных образовательных технологий и электронного обучения полностью или частично.

2. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Изучение дисциплины направлено на приобретение следующих **компетенций и индикаторов их достижения:**

Профессиональные компетенции и индикаторы их достижения:

Задача профессиональной деятельности	Объект или область знания	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК	Основание (профессиональный стандарт, анализ опыта) Обобщенные трудовые функции
Научно-исследовательский тип задач профессиональной деятельности				
Выполнение фундаментальных и прикладных работ поискового, теоретического и экспериментального характера с целью определения технических характеристик новой техники, а также комплекса работ по разработке технологической документации.	Химическое, химико-технологическое производство Сквозные виды профессиональной деятельности в промышленности (в сфере организации и проведения научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ в области химического и химико-технологического производства).	ПК-2. Способен к поиску, обработке, анализу и систематизации научно-технической информации по теме исследования, выбору методик и средств решения задачи	ПК-2.1. Знает алгоритм поиска, оценки и анализа научно-технической информации; ПК-2.2. Умеет обобщать и систематизировать научно-техническую информацию; ПК-2.3. Владеет навыками соотнесения результатов собственной научной работы с отечественным и зарубежным опытом по тематике исследования.	Профессиональный стандарт 40.011 «Специалист по научно-исследовательским и опытно-конструкторским разработкам», утвержденный приказом Министерства труда и социальной защиты Российской Федерации от 04.03.2014 № 121 н, Обобщенная трудовая функция С. Проведение научно-исследовательских и опытно-конструкторских разработок. С /01.6. Осуществление научного руководства проведением исследований по отдельным задачам (уровень квалификации – 6).
		ПК-5 Способен осуществлять самостоятельные научные исследования в области химии и технологии биологически активных веществ	ПК-5.1. Знает методы получения, особенности производства, свойства и механизмы действия биологически активных веществ различных классов; ПК-5.2. Знает теоретические основы функционирования живых организмов в норме и при патологии, необходимые для осуществления научных исследований по химии биологически активных веществ;	

В результате изучения дисциплины студент магистратуры должен:

Знать:

- классификацию лекарственных препаратов;
- основные понятия фармакокинетики (введение ЛС, всасывание, распределение, депонирование, метаболизм, выведение);
- основные фармакологические эффекты, понятия метаболит, антиметаболит, определение «рецептор», типы рецепторов и т. д.;
- основные подходы для синтеза антиметаболитов.

Уметь:

- работать со специальной литературой: регистром лекарственных средств, Государственной Фармакопеей РФ.

Владеть:

- теоретическими знаниями в области синтеза и анализа фармакологически активных веществ.

3. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Вид учебной работы	Объем дисциплины		
	ЗЕ	Акад. ч.	Астр. ч.
Общая трудоемкость дисциплины	4	144	108
Контактная работа – аудиторные занятия:	1,42	51	38,25
Лекции	0,95	34	25,5
Практические занятия	0,47	17	12,75
в том числе в форме практической подготовки	0,47	17	12,75
Самостоятельная работа	1,58	57	42,75
Самостоятельное изучение разделов дисциплины	1,58	57	42,57
Вид контроля:			
Экзамен	1	36	27
Контактная работа – промежуточная аттестация	1	0,4	0,3
Подготовка к экзамену.		35,6	26,7
Вид итогового контроля:	Экзамен		

4. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

4.1. Разделы дисциплины и виды занятий

№ п/п	Раздел дисциплины	Академ. часов					
		Всего	в т.ч. в форме пр. подг.	Лекции	Прак. зан.	в т.ч. в форме пр. подг.	Сам. работа
	Введение	3	-	1	-	-	2
1.	Общая фармакология	34	4	10	4	4	20
1.1	Фармакокоинетика. Основные понятия	7	1	2	1	1	4
1.2	Метаболизм ксенобиотиков	7	1	2	1	1	4
1.3	Фармакодинамика. Основные понятия	7	1	2	1	1	4
1.4	Нейромедиаторные процессы	7	1	2	1	1	4
1.5	Ферменты и гормоны	6	-	2	-	-	4
2.	Разработка лекарственных средств	10	2	2	2	2	6
3.	Отдельные классы лекарственных средств	42	5	17	5	5	20
3.1	Средства, действующие на нервную систему	10	1	4	1	1	5
3.2	Средства, действующие на сердечно-сосудистую систему	9	1	3	1	1	5
3.3	Хемиотерапевтические противомикробные средства	11,5	1,5	5	1,5	1,5	5
3.4.	Хемиотерапевтические противораковые средства	11,5	1,5	5	1,5	1,5	5
4.	Избранные вопросы современной медицинской химии	17	4	4	4	4	9
	ИТОГО	108	17	34	17	17	57
	Экзамен	36	-	-	-	-	-
	ИТОГО	144	-	-	-	-	-

4.2 Содержание разделов дисциплины

Введение. Предмет медицинской химии. История развития медицинской химии. Ключевые открытия в медицинской химии и их влияние на развитие медицины и общества в целом. Связь медицинской химии с другими отраслями науки. Общественная значимость фармакологии и фармакологической индустрии. Определение лекарства. Взаимосвязь строения и свойств. Фармакокинетика и фармакодинамика. Токсическая и эффективная дозы. Видовые и возрастные различия.

Раздел 1. Общая фармакология

1.1 Фармакокинетика. Основные понятия. Определение фармакокинетики. Строение прокариотической и эукариотической клеток. Строение клеточных мембран. Адсорбция. Способы введения лекарств в организм, их особенности. Биодоступность. Зависимость биодоступности от лекарственной формы. Пути проникновения веществ в клетку. Мембранные поры, каналы и насосы. Активный и пассивный транспорт. Значение липофильности и ионизации веществ. Распределение и накопление лекарств в органах и тканях. Условия подобия лекарству (правила Липински).

1.2 Метаболизм ксенобиотиков. Лекарства как ксенобиотики. Первая стадия метаболизма ксенобиотиков. Оксигеназы смешанных функций и катализируемые ими процессы функционализации липофильных молекул. Индуцирование оксигеназ химически инертными ксенобиотиками на примере тетрахлордibenзодидоксина. Изменение активности веществ в процессе метаболизма. Пролектарства. Вторая стадия метаболизма ксенобиотиков. Сочетание с глюкуроновой кислотой, сульфатом, глутатионом. Роль микрофлоры кишечника в метаболизме ксенобиотиков. Выведение лекарств из организма. Взаимодействие лекарств. Фармакокинетический синергизм и антагонизм.

1.3 Фармакодинамика. Основные понятия. Определение фармакодинамики. Типы рецепторов: ионотропные и метаботропные рецепторы. Локализация рецепторов в клетке. Условия взаимодействия лекарства с рецептором. Значение хиральности молекул. Модели взаимодействия малой молекулы и макромолекулы: «ключ-замок» и индуцированное соответствие. Силы, участвующие во взаимодействии. Нативные лиганды, агонисты, антагонисты, обратные агонисты. Синергизм и антагонизм – фармакодинамический аспект.

1.4 Нейромедиаторные процессы. Процесс распространения и передачи нервного импульса. Значение и принципиальные способы воздействия на процессы передачи нервных импульсов. Ацетилхолин, холинэстераза, типы холинорецепторов. Норадреналин, адренорецепторы, их типы. Эффект стимуляции и блокады, примеры лекарств. Дофамин, дофаминовые рецепторы. Серотонин и его рецепторы. Стимуляторы и антагонисты гистаминовых рецепторов. ГАМК, ее роль. Пептидные нейромедиаторы. Опиатные рецепторы. Опиаты. Естественные антагонисты опиатных рецепторов. Морфин, механизм воздействия, абстинентный синдром. Психологическая зависимость.

1.5 Ферменты и гормоны. Ферментативный катализ. Принцип действия ферментов. Ферменты – определение, классификация, строение, номенклатура. Коферменты. Регуляторные ферменты. Ингибирование ферментов. Обратимое ингибирование, типы обратимого ингибирования. Необратимое ингибирование. Инактивация. Медленное прочное связывание. Метаболиты и антиметаболиты. Ангиотензин-конвертирующий фермент, его роль. Примеры лекарств, действующих на ферментативные системы – обратимые и необратимые ингибиторы. Определение гормонов, разница между гормонами и нейромедиаторами. Железы внутренней секреции. Классификация гормонов. Пептидные гормоны. Инсулин. Сахарный диабет. Аминные гормоны. Адреналин. Тироксин и гормоны щитовидной железы. Дефицит йода. Стероидные гормоны. Глюкокортикоиды и минералокортикоиды.

Раздел 2. Разработка лекарственных средств

Драг-дизайн – определение. История направленного конструирования лекарственных веществ. Основные понятия. Этапы создания лекарства. Определение и валидация мишени. Комбинаторная химия. Скрининг, его виды. Достоинства и недостатки комбинаторного подхода. Поиск новых лекарственных средств в природных источниках. Подход к драг-дизайну на основе природных соединений. Роль вычислительной техники, молекулярный докинг. Клинические испытания. Добровольцы. Вопросы этики в клинических испытаниях. Двойной слепой метод организации испытаний. Стадии клинических испытаний. Вопросы интеллектуальной собственности. стоимость разработки лекарственных средств. Торговые названия. Дженерики. Подделка лекарственных средств.

Раздел 3. Отдельные классы лекарственных средств

3.1 Средства, действующие на нервную систему. Способы классификации лекарственных средств. Классификация по лечебному действию, по строению, по источникам получения. Группы лекарственных средств по Машковскому. Особое положение средств для диагностики. Средства для наркоза: средства для ингаляционного и неингаляционного наркоза. Психотропные лекарственные средства. Нейролептики. Социальная значимость нейролептических препаратов. Успокоительные (анксиолитические) препараты, их основное и побочное действие. Клиническая депрессия и антидепрессанты. Ингибиторы моноаминоксидазы и ингибиторы обратного захвата серотонина. Снотворные средства. Требования, предъявляемые к снотворным средствам. Противосудорожные (противоэпилептические) препараты. Ноотропные препараты. Обезболивающие препараты. Наркотические обезболивающие средства – опиаты и опиоиды. Привыкание, физиологическая зависимость. Ненаркотические обезболивающие средства и нестероидные противовоспалительные препараты. Вещества, возбуждающие нервную систему – интенсификация процессов возбуждения в головном и спинном мозге. Средства для лечения паркинсонизма – холинэргические и дофаминэргические. Рвотные и противорвотные препараты.

Средства, влияющие на холинэргические синапсы. взаимодействие лекарств с М- и Н-холинорецепторами. Вещества, взаимодействующие с адренорецепторами. Альфа-адреномиметики и адреноблокаторы. Бета-адреномиметики и адреноблокаторы. Вещества, взаимодействующие с гистаминовыми рецепторами. Противоаллергические и противоязвенные антигистаминовые препараты. Средства для местной анестезии. Способы применения средств для местной анестезии.

3.2 Средства, действующие на сердечно-сосудистую систему. Классификация средств, действующих на сердечно-сосудистую систему. Кардиотонические средства. Сердечные гликозиды – препараты наперстянки. Опасности, связанные с применением сердечных гликозидов. Синтетические кардиотонические средства. Аритмия. Антиаритмические препараты различных классов. Антигипертензивные препараты. Ингибиторы ангиотензин-конвертирующего фермента. Блокаторы ангиотензиновых рецепторов. Спазмолитики. Мочегонные препараты. Салуретики, калий-сберегающие препараты, осмотические диуретики.

3.3 Хемиотерапевтические противомикробные средства. Различия хемиотерапевтических и фармакодинамических лекарственных средств. Антибактериальные препараты – история появления, общественная значимость. Мишени для воздействия на бактериальную клетку. Антибиотики как природные или полусинтетические антибактериальные препараты. Группы антибиотиков – бета-лактамы, тетрациклины, аминогликозиды, макролиды. Резистентность бактерий к антибиотикам. Причины возникновения резистентности. Перекрестная резистентность. Фармакологические методы борьбы с резистентностью. Ингибиторы бета-лактамаз. Комбинированные препараты. Административные методы борьбы с резистентностью бактерий. Синтетические антибактериальные препараты. Сульфамидные производные.

Синергетический и антагонистический результат совместного применения антибактериальных препаратов. Производные хинолина. Фторхинолоны. Производные нитрофурана. Препараты для лечения туберкулеза. Противовирусные препараты.

3.4 Хемиотерапевтические противораковые средства. Онкологические заболевания как болезни, актуальные для развитых стран. Принципиальные подходы к химиотерапии раковых заболеваний. Классификация противораковых средств. Антипролифератические препараты. Неоангиогенез. Алкиляторы как противораковые средства. Производные бета-хлорэтиламинов. Антиметаболиты. Производные фторурацила. Природные антипролифератические средства. Противораковые антибиотики. Стабилизаторы веретена деления. Топоизомеразы, их ингибирование как способ остановки репликации ДНК. Препараты на основе платины. Плоско-квадратная структура комплексов. Побочные эффекты антипролифератических препаратов.

Раздел 4. Избранные вопросы современной медицинской химии. Вопросы доказательной медицины. Разница в подходе к спорным методикам в различных научных школах. Эффект плацебо и способы его нивелирования. Опасность гомеопатии и иных антинаучных методик. Прионные заболевания, прионы как особый класс инфекционных агентов. Анигипоксанты и антиоксиданты. Иммуносупрессоры и иммуномодуляторы. Основные положения стандартов GLP и GMP (надлежащей лабораторной и производственной практики). Особенности получения лекарственных средств из растительного сырья. Методы установления первичной, вторичной и третичной структуры белков. Жизненный цикл и классификация вирусов. Нобелевские премии по химии за последние годы с точки зрения применения в медицинской химии.

5. СООТВЕТСТВИЕ СОДЕРЖАНИЯ ТРЕБОВАНИЙ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

№	В результате освоения дисциплины студент должен:		Раздел 1	Раздел 2	Раздел 3	Раздел 4
	Знать:					
1	– классификацию лекарственных препаратов;				+	+
2	– основные понятия фармакокинетики (введение ЛС, всасывание, распределение, депонирование, метаболизм, выведение);		+			+
3	– основные фармакологические эффекты, понятия метаболит, антиметаболит, определение «рецептор», типы рецепторов и т. д.;		+			+
4	– основные подходы для синтеза антиметаболитов.			+	+	+
	Уметь:					
5	– работать со специальной литературой: регистром лекарственных средств, Государственной Фармакопеей РФ.		+	+	+	+
	Владеть:					
6	– теоретическими знаниями в области синтеза и анализа фармакологически активных веществ.		+	+	+	+
В результате освоения дисциплины студент должен приобрести следующие <i>профессиональные компетенции и индикаторы их достижения:</i>						
	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК				
7	ПК-2. Способен к поиску, обработке, анализу и систематизации научно-технической информации по теме исследования, выбору методик и средств решения задачи	ПК-2.1. Знает алгоритм поиска, оценки и анализа научно-технической информации;	+	+	+	+
		ПК-2.2. Умеет обобщать и систематизировать научно-техническую информацию;	+	+	+	+
		ПК-2.3. Владеет навыками соотнесения результатов собственной научной работы с отечественным и зарубежным опытом по тематике исследования.	+	+	+	+
8	ПК-5 Способен осуществлять самостоятельные научные исследования в области	ПК-5.1. Знает методы получения, особенности производства, свойства и механизмы действия биологически активных веществ различных классов;		+	+	+

	химии и технологии биологически активных веществ	ПК-5.2. Знает теоретические основы функционирования живых организмов в норме и при патологии, необходимые для осуществления научных исследований по химии биологически активных веществ;	+	+	+	+

6. ПРАКТИЧЕСКИЕ И ЛАБОРАТОРНЫЕ ЗАНЯТИЯ

6.1. Практические занятия

Примерные темы практических занятий по дисциплине.

№ п/п	№ раздела дисциплины	Темы практических занятий	Часы
1	1	Фармакокоинетика. Основные понятия	1
2		Метаболизм ксенобиотиков	1
3		Фармакодинамика. Основные понятия	1
4		Нейромедиаторные процессы	1
6	2	Основные принципы процесса разработки лекарственных средств	2
7	3	Средства, действующие на нервную систему	1
8		Средства, действующие на сердечно-сосудистую систему	1
9		Хемиотерапевтические противомикробные средства	1,5
10		Хемиотерапевтические противораковые средства	1,5
11	4	Избранные вопросы современной медицинской химии	4

7. САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА

Самостоятельная работа проводится с целью углубления знаний по дисциплине и предусматривает:

- ознакомление и проработку рекомендованной литературы, работу с электронно-библиотечными системами, включая переводы публикаций из научных журналов, цитируемых в базах Scopus, Web of Science, Chemical Abstracts, РИНЦ;
- посещение отраслевых выставок и семинаров;
- участие в семинарах РХТУ им. И. Менделеева по тематике дисциплины;
- подготовку к выполнению контрольных работ по материалу лекционного курса;
- подготовку реферата по индивидуальной тематике;
- подготовку к сдаче экзамена по дисциплине.

Планирование времени на самостоятельную работу, необходимого на изучение дисциплины, студентам лучше всего осуществлять на весь период изучения, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала. Материал, законспектированный на лекциях, необходимо регулярно дополнять сведениями из литературных источников, представленных в рабочей программе. При работе с указанными источниками рекомендуется составлять краткий конспект материала, с обязательным фиксированием библиографических данных источника.

8. ПРИМЕРЫ ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ КОНТРОЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Совокупная оценка по дисциплине складывается из оценок за выполнение контрольных работ (максимальная оценка 45 баллов), реферата (максимальная оценка 15 баллов) и итогового контроля в форме экзамена (максимальная оценка 40 баллов).

8.1. Примерная тематика реферативно-аналитической работы.

Примерный перечень тем рефератов:

Для указанного лекарственного препарата необходимо провести реферативно-аналитическое исследование и подготовить реферат. В реферате должны быть отражены следующие вопросы: история разработки препарата, его основное биологическое действие, применение в медицинской практике, особенности фармакокинетики и фармакодинамики, актуальная схема синтеза действующего вещества, лекарственные формы, в виде которых препарат применяется, спектр побочного действия препарата, особенности метаболизма и выведения.

- 1) Абиратерон
- 2) Ацетаминофен
- 3) Амфетамин
- 4) Атазанавир
- 5) Атенолол
- 6) Бупренофин
- 7) Бупивакаин
- 8) Валсатран
- 9) Галоперидол
- 10) Гидрокортизон
- 11) Дабигатран
- 12) Дарунавир
- 13) Дигоксин
- 14) Доксициклин
- 15) Дулоксетин
- 16) Кетоконазол
- 17) Левотироксин
- 18) Лидокаин
- 19) Лизиноприл
- 20) Метилфенидат
- 21) Мельдоний
- 22) Модафинил
- 23) Остельмавир
- 24) Омепразол
- 25) Оксикодон
- 26) Ралоксифен
- 27) Сальбутамол

- 28) Сальварсан
- 29) Силденафил
- 30) Солифенацин
- 31) Тенофовир
- 32) Талидомид
- 33) Флутиказон
- 34) Флуцитозин
- 35) Фуросемид
- 36) Циклофосфан

8.2. Примеры контрольных вопросов для текущего контроля освоения дисциплины

Для текущего контроля предусмотрено 3 контрольных работы (по одной контрольной работе для первого, третьего и четвертого разделов). Максимальная оценка за контрольные работы составляет по 15 баллов за каждую.

Раздел 1. Общая фармакология. Примеры вопросов к контрольной работе № 1. Максимальная оценка – 15 баллов. Контрольная работа содержит 3 вопроса, по 5 баллов за вопрос.

Вопрос 1.1.

1. Медицинская химия – предмет, история развития. Фармакокинетика – определение, общие положения.
2. Взаимосвязь между структурой органического вещества и биологической активностью. Условия подобия лекарству (Правила Липински). Значение оптической активности молекул.
3. Основные процессы, происходящие с веществами в организме (ADME) – общая характеристика.
4. Строение биологических мембран. Пути проникновения химических веществ через мембраны.
5. Метаболизм лекарственных веществ. Пролекарства.
6. Распространение и передача нервного импульса. Нейромедиаторы. Способы влияния на передачу и распространение нервного импульса.

Вопрос 1.2

1. Фармакодинамика – определение, предмет. Рецепторы. Биохимические мишени для лекарственных средств. Связывание лекарства с мишенью.
2. Мишени для разработки лекарственных средств. Виды рецепторов – сходства и различия
3. Агонисты и антагонисты. Различия, сходства, примеры.

Вопрос 1.3.

1. Холинорецепторы. Способы влияния на передачу нервного импульса.
2. Адренорецепторы. Способы влияния на передачу нервного импульса.
3. ГАМК-рецепторный комплекс. Способы влияния на передачу нервного импульса.
4. Гормоны, их роль в организме. Типы гормонов.

Раздел 2. Разработка лекарственных средств. Итоговый контроль по Разделу 2 проводится в форме реферата, максимальная оценка за который составляет 15 баллов.

Раздел 3. Отдельные классы лекарственных средств. Примеры вопросов к контрольной работе № 2. Максимальная оценка – 15 баллов. Контрольная работа содержит 3 вопроса, по 5 баллов за вопрос.

Вопрос 3.1.

1. Взаимодействие лекарственных веществ в организме.
2. Ингибирование ферментативных реакций – общие положения. Лекарственные средства, вызывающие обратимое ингибирование.
3. Ингибирование ферментативных реакций – общие положения. Лекарственные средства, вызывающие необратимое ингибирование.

Вопрос 3.2.

1. Фармакодинамические и химиотерапевтические препараты – сходства, различия.
2. Средства, влияющие на центральную нервную систему. Средства для наркоза.
3. Обезболивающие и противовоспалительные средства. Проблема привыкания и зависимости.
4. Психотропные средства. Нейролептики, транквилизаторы, антидепрессанты.
5. Психотропные средства. Ноотропные препараты и стимуляторы ЦНС
6. Снотворные средства.
7. Средства для лечения паркинсонизма. Рвотные и противорвотные препараты.
8. Препараты для местной анестезии. Способы их применения.
9. Вещества, влияющие на холинэргические синапсы.

Вопрос 3.3.

1. Природные и синтетические кардиотонические средства
2. Антиаритмические препараты.
3. Антиангинальные средства. Органические нитраты
4. Ангиотензиновая система и средства, влияющие на нее
5. Спазмолитики и диуретики
6. Принципы воздействия на бактерии. Антибиотики.
7. Принципы воздействия на бактерии. Синтетические антибактериальные препараты.
8. Противовирусные препараты.
9. Препараты для химиотерапии рака.

Раздел 4. Примеры вопросов к контрольной работе № 3. Максимальная оценка – 15 баллов. Контрольная работа содержит 5 тестовых вопросов и 5 вопросов, в которых необходимо дать краткий и емкий ответ, тестовые вопросы оцениваются по 1 баллу за вопрос, другие – по 2 балла за вопрос

Вопрос 4.1.

Отметьте верно или неверно утверждение. Утверждение, неверное частично, считать неверным полностью.		Верно	Неверно
1	Химические превращения лекарства зависят от способа введения его в организм		
2	Клинические исследования проводятся исключительно с привлечением добровольцев, по демографическим данным наиболее близких к потенциальным потребителям исследуемого лекарства		
3	Регуляторные центры ферментов могут являться мишенями при разработке лекарств, активные центры – не могут		

4	Необратимые ингибиторы не используются в качестве лекарственных средств		
5	Источником стероидных гормонов является гипоталамус, но не гипофиз		
6	Любой ксенобиотик, попавший в организм, подвергается химическим превращениям		
7	Наибольшее число химических синапсов в человеческом организме являются холинэргическими		
8	Заряженные частицы способны проникать внутрь клетки		
9	Скорость и продолжительность физиологического ответа клетки на воздействие нейромедиатора зависят от типа рецептора		
10	Гормоны могут воздействовать на нейромедиаторные рецепторы		

В вопросах укажите верный ответ (или ответы)

11) К межмолекулярным взаимодействиям относятся:

- А. ион-дипольные взаимодействия
- Б. диполь-дипольные взаимодействия
- В. силы Ван-дер-Ваальса
- Г. водородные связи
- Д. ион-ионные взаимодействия
- Е. π -стэкинг

12) Обязательными компонентами клеточной мембраны являются:

- А. Митохондрии
- Б. ДНК
- В. РНК
- Г. Стероидные соединения
- Д. Ксенобиотики
- Е. Белки

13) Вещества, не воздействующие (напрямую) на постсинаптические рецепторы:

- А. Диоксин
- Б. Никотин
- В. Адреналин
- Г. Норадреналин
- Д. Инсулин
- Е. Гамма-аминомасляная кислота

Вопрос 4.2.

В вопросах дайте краткий ответ

1. Исследование ингибитора *in vitro* подтверждает необратимость ингибирования определенного фермента, но при исследовании того же вещества на лабораторных животных активность этого фермента через некоторое время восстановилась. Дайте объяснение.
2. За счёт какого механизма прохождения вещества сквозь мембрану в клетках щитовидной железы накапливается йод? Дайте объяснение.
3. Опишите принцип воздействия обратного агониста на рецептор.
4. Укажите, каким образом можно повлиять на передачу сигнала возбуждения в химическом синапсе (Перечислите принципиальные подходы)
5. Укажите условия подобия лекарству («правило пяти»). Приведите обоснования.
6. Опишите сходства и различия метаботропных и ионотропных рецепторов.
7. Укажите, к каким группам препаратов относится *амоксциллин*, согласно различным способам классификации лекарственных средств.
8. Какова причина синергического действия триметоприма и сульфамидных

- препаратов?
9. Приведите требования, предъявляемые к снотворным средствам.
 10. В чем различие механизмов действия антидепрессантов первого поколения (ипрониазид) и трициклических антидепрессантов (дезипрамин).
 11. Почему, несмотря на миорелаксирующее действие препаратов для общего наркоза, на практике применяются специальные миорелаксанты?
 12. Перечислите способы применения средств для местной анестезии.
 13. Природные кардиотонические средства – источник, строение, применение, недостатки.
 14. Почему наличие фосфатной группы в противогепатитном препарате софосбувир (Совалди) увеличивает его эффективность?
 15. Опишите возможные подходы к проблеме борьбы с возникновением у бактерий резистентности к антибактериальным препаратам.

8.3. Вопросы для итогового контроля освоения дисциплины (3 семестр – экзамен)

Экзаменационный билет включает контрольные вопросы по всем разделам рабочей программы дисциплины и содержит 2 вопроса по 20 баллов.

1. Медицинская химия – предмет, история развития. Фармакокинетика – определение, общие положения.
2. Взаимосвязь между структурой органического вещества и биологической активностью. Условия подобия лекарству (Правила Липински). Значение оптической активности молекул.
3. Основные процессы, происходящие с веществами в организме (ADME) – общая характеристика.
4. Строение биологических мембран. Пути проникновения химических веществ через мембраны.
5. Метаболизм лекарственных веществ. Пролекарства.
6. Распространение и передача нервного импульса. Нейромедиаторы. Способы влияния на передачу и распространение нервного импульса.
7. Фармакодинамика – определение, предмет. Рецепторы. Биохимические мишени для лекарственных средств. Связывание лекарства с мишенью.
8. Мишени для разработки лекарственных средств. Виды рецепторов – сходства и различия.
9. Агонисты и антагонисты. Различия, сходства, примеры.
10. Холинорецепторы. Способы влияния на передачу нервного импульса.
11. Адренорецепторы. Способы влияния на передачу нервного импульса.
12. ГАМК-рецепторный комплекс. Способы влияния на передачу нервного импульса.
13. Гормоны, их роль в организме. Типы гормонов.
14. Взаимодействие лекарственных веществ в организме.
15. Ингибирование ферментативных реакций – общие положения.
16. Лекарственные средства, вызывающие обратимое ингибирование.
17. Ингибирование ферментативных реакций – общие положения.
18. Лекарственные средства, вызывающие необратимое ингибирование.
19. Фармакодинамические и химиотерапевтические препараты – сходства, различия.
20. Средства, влияющие на центральную нервную систему. Средства для наркоза.
21. Обезболивающие и противовоспалительные средства. Проблема привыкания и зависимости.
22. Психотропные средства. Нейролептики, транквилизаторы, антидепрессанты.
23. Психотропные средства. Ноотропные препараты и стимуляторы ЦНС.
24. Снотворные средства.

25. Средства для лечения паркинсонизма. Рвотные и противорвотные препараты.
26. Препараты для местной анестезии. Способы их применения.
27. Вещества, влияющие на холинэргические синапсы.
28. Природные и синтетические кардиотонические средства.
29. Антиаритмические препараты.
30. Антиангинальные средства. Органические нитраты.
31. Ангиотензиновая система и средства, влияющие на нее.
32. Спазмолитики и диуретики.
33. Принципы воздействия на бактерии. Антибиотики.
34. Принципы воздействия на бактерии. Синтетические антибактериальные препараты.
35. Противовирусные препараты.
36. Препараты для химиотерапии рака.

Фонд оценочных средств приведен в виде отдельного документа, являющегося неотъемлемой частью основной образовательной программы.

8.4. Структура и примеры билетов для экзамена

Экзамен по дисциплине «Медицинская химия. Основы фармакологии» проводится в 3 семестре и включает контрольные вопросы по всем разделам рабочей программы дисциплины. Билет для экзамена состоит из 2-х вопросов, относящихся к указанным разделам.

Пример билета для экзамена:

«Утверждаю» Зав. каф. ХТБМП _____ М.С. Ощепков «__» _____ 20__ г.	Министерство науки и высшего образования РФ
	Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева
	Кафедра химии и технологии биомедицинских препаратов
	18.04.01 Химическая технология
	Магистерская программа – «Химия и технология биологически активных веществ»
«Медицинская химия. Основы фармакологии»	
Билет № 1	
1. Фармакодинамика – определение, предмет. Рецепторы. Биохимические мишени для лекарственных средств. Связывание лекарства с мишенью. 2. Природные и синтетические кардиотонические средства.	

9. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

9.1. Рекомендуемая литература.

А. Основная литература

1. Коваленко Л.В., Попков С.В. Психоактивные соединения. Химия и биологическая активность: Учебное пособие - М.: Издательство РХТУ, 2012. - 124 с.
2. Попков С.В., Кузенков А.В., Бурдейный М.Л., Захарычев В.В., Дашкин Р.Р., Шарипов М.Ю., Ярёмченко И.А. Получение синтетических биологически активных

веществ и промежуточных продуктов: учебн. пособие Лабораторный практикум. – М.: РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2017. – 144 с.

3. Граник В.Г. Основы медицинской химии. М: Вузовская книга, 2001. – 384 с. (Базовый учебник).

Б. Дополнительная литература

1. Солдатенков, А. Т. Основы органической химии лекарственных веществ [Текст] / А.Т. Солдатенков, Н.М. Колядина, И.В. Шендрик. – М.: Химия, 2001. – 192 с.

2. Люльман Х., Мор К., Хайн Л. Наглядная фармакология / Пер. с нем. – М.: Мир, 2008. – 383 с.

3. Коваленко, Л. В. Биохимические основы химии биологически активных веществ – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2014. – 229 с.

4. Эллиот, В. Биохимия и молекулярная биология. М.: МАИК «Наука-Интерпериодика», 2002. – 237 с. (Базовый учебник).

9.2. Рекомендуемые источники научно-технической информации

- «Journal of medicinal chemistry», ISSN: 0022-2623
- «Medicinal chemistry», ISSN: 1875-6638
- «Известия РАН, серия химическая», ISSN: 0002-3353
- «Успехи химии», ISSN: 0042-1308
- «Tetrahedron», ISSN: 0040-4020
- «Tetrahedron Letters», ISSN: 0040-4039
- «Journal of Organic Chemistry», ISSN: 0022-3263
- «Journal of the American Chemistry Society», ISSN: 0002-7863
- «European Journal of Organic Chemistry», ISSN: 1099-069

10. ПЕРЕЧЕНЬ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ В ОБРАЗОВАТЕЛЬНОМ ПРОЦЕССЕ

Информационную поддержку изучения дисциплины осуществляет Информационно-библиотечный центр (ИБЦ) РХТУ им. Д.И. Менделеева, который обеспечивает обучающихся основной учебной, учебно-методической и научной литературой, необходимой для организации образовательного процесса по дисциплине. Общий объем многоотраслевого фонда ИБЦ на 01.01.2024 г. составляет 1 559 436 экз.

Фонд ИБЦ располагает учебной, учебно-методической и научно-технической литературой в форме печатных и электронных изданий, а также включает официальные, справочно-библиографические, специализированные отечественные и зарубежные периодические и информационные издания. ИБЦ обеспечивает доступ к профессиональным базам данных, информационным, справочным и поисковым системам.

Каждый обучающийся обеспечен свободным доступом из любой точки, в которой имеется доступ к сети Интернет и к электронно-библиотечной системе (ЭБС) Университета, которая содержит различные издания по основным изучаемым дисциплинам и сформирована по согласованию с правообладателями учебной и учебно-методической литературы.

Для более полного и оперативного справочно-библиографического и информационного обслуживания в ИБЦ реализована технология Электронной доставки документов.

Полный перечень электронных информационных ресурсов, используемых в процессе обучения, представлен в основной образовательной программе.

4. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

В соответствии с учебным планом занятия по дисциплине «Медицинская химия. Основы фармакологии» проводятся в форме лекций, практических занятий и самостоятельной работы обучающегося.

11.1. Оборудование, необходимое в образовательном процессе:

Лекционная учебная аудитория, оборудованная электронными средствами демонстрации (компьютер со средствами звуковоспроизведения, проектор, экран) и учебной мебелью.

11.2. Учебно-наглядные пособия:

Иллюстрации к разделам лекционного курса и практическим занятиям; графики и таблицы, иллюстрирующие лекционный материал.

11.3. Компьютеры, информационно-телекоммуникационные сети, аппаратно-программные и аудиовизуальные средства:

Персональные компьютеры в аудитории для самостоятельной подготовки обучающихся, укомплектованные принтерами и программными средствами; проекторы и экраны; цифровые камеры; копировальные аппараты; локальная сеть с выходом в Интернет.

11.4. Печатные и электронные образовательные и информационные ресурсы:

Электронные образовательные ресурсы: электронные презентации к разделам лекционного курса; учебно-методические разработки в электронном виде.

11.5. Перечень лицензионного программного обеспечения:

№ п/п	Наименование программного продукта	Реквизиты договора поставки	Примечание	Срок окончания действия лицензии
1.	Microsoft Office Standard 2013	Контракт № 62-64ЭА/2013 от 02.12.2013	Лицензия на ПО, принимающее участие в образовательных процессах.	Бессрочная
2.	Microsoft Office Professional Plus 2019 В составе: Word, Excel, Power Point, Outlook, OneNote, Access, Publisher, InfoPath	Контракт № 28-35ЭА/2020 от 26.05.2020	Лицензия на ПО, принимающее участие в образовательных процессах.	12 месяцев (ежегодное продление подписки с правом перехода на обновлённую версию продукта)
3.	Kaspersky Endpoint Security для бизнеса – Стандартный Russian Edition.	Контракт № 90-133ЭА/2021 от 07.09.2021	Лицензия на ПО, не принимающее прямого участия в образовательных процессах (инфраструктурное/вспомогательное ПО)	12 месяцев (ежегодное продление подписки с правом перехода на обновлённую версию продукта)
4.	«Антиплагиат.ВУЗ 5.0»	Контракт от 08.05.2024 №34-523К/2024	Лимит проверок 10 000	19.05.2025

12. ТРЕБОВАНИЯ К ОЦЕНКЕ КАЧЕСТВА ОСВОЕНИЯ ПРОГРАММЫ

Наименование разделов	Основные показатели оценки	Формы и методы контроля и оценки
Раздел 1. Общая фармакология	<i>Знает:</i> - основные понятия фармакокинетики (введение ЛС, всасывание, распределение, депонирование, метаболизм, выведение); - основные фармакологические эффекты, понятия метаболит, антиметаболит, определение «рецептор», типы рецепторов и т.д. <i>Умеет:</i> - работать со специальной литературой: регистром лекарственных средств, Государственной Фармакопеей РФ. <i>Владеет:</i> - теоретическими знаниями в области синтеза и анализа фармакологически активных веществ.	Оценка за контрольную работу №1 Оценка за экзамен
Раздел 2. Разработка лекарственных средств	<i>Знает:</i> - основные подходы для синтеза антиметаболитов <i>Умеет:</i> - работать со специальной литературой: регистром лекарственных средств, Государственной Фармакопеей РФ. <i>Владеет:</i> - теоретическими знаниями в области синтеза и анализа фармакологически активных веществ.	Оценка за реферат Оценка за экзамен
Раздел 3. Отдельные классы лекарственных средств	<i>Знает:</i> - классификацию лекарственных препаратов; - основные подходы для синтеза антиметаболитов; <i>Умеет:</i> - работать со специальной литературой: регистром лекарственных средств, Государственной Фармакопеей РФ. <i>Владеет:</i> - теоретическими знаниями в области синтеза и анализа фармакологически активных веществ.	Оценка за контрольную работу №2 Оценка за экзамен
Раздел 4. Избранные вопросы современной медицинской химии	<i>Знает:</i> - классификацию лекарственных препаратов; - основные понятия фармакокинетики (введение ЛС, всасывание, распределение, депонирование, метаболизм, выведение);	Оценка за контрольную работу №3 Оценка за экзамен

	- основные фармакологические эффекты, понятия метаболит, антиметаболит, определение «рецептор», типы рецепторов и т.д. - основные подходы для синтеза антиметаболитов; <i>Умеет:</i> - работать со специальной литературой: регистром лекарственных средств, Государственной Фармакопеей РФ. <i>Владеет:</i> - теоретическими знаниями в области синтеза и анализа фармакологически активных веществ.	

13. ОСОБЕННОСТИ ОРГАНИЗАЦИИ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО ПРОЦЕССА ДЛЯ ИНВАЛИДОВ И ЛИЦ С ОГРАНИЧЕННЫМИ ВОЗМОЖНОСТЯМИ ЗДОРОВЬЯ

Обучение инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья осуществляется в соответствии с:

- Порядком организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры (Приказ Министерства науки и высшего образования Российской Федерации от 06.04.2021 № 245);

- Положением о порядке организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева», принятым решением Ученого совета РХТУ им. Д.И. Менделеева от 28.12.2022, протокол № 5;

- Методическими рекомендациями по организации образовательного процесса для обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья в образовательных организациях высшего образования, в том числе оснащённости образовательного процесса (утверждены заместителем Министра образования и науки РФ А.А. Климовым от 08.04.2014 № АК-44/05вн).

**Дополнения и изменения к рабочей программе дисциплины
«Медицинская химия. Основы фармакологии»**

**основной образовательной программы
по направлению подготовки 18.04.01 Химическая технология,
магистерская программа – «Химия и технология биологически активных веществ»**

Форма обучения: **очная**

Номер изменения/ дополнения	Содержание дополнения/изменения	Основание внесения изменения/дополнения
1.		протокол заседания Ученого совета №_____от «___»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «___»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «___»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «___»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «___»_____20__г.

**Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Российский химико-технологический университет
имени Д.И. Менделеева»**

«УТВЕРЖДЕНО»
на заседании Ученого совета
РХТУ им. Д.И. Менделеева
протокол № 1 от «29» августа 2024 г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
«Основы реакционной способности и механизмы реакций
органических соединений»**

Направление подготовки 18.04.01 Химическая технология

**Магистерская программа:
«Химия и технология биологически активных веществ»**

Квалификация «магистр»

Москва 2024

Программа составлена на кафедре Химии и технологии биомедицинских препаратов.
Автор программы: д.х.н., профессор Офицеров Е.Н.

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры Химии и технологии биомедицинских препаратов «16» апреля 2024 г., протокол №7.

1. ЦЕЛЬ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ

Программа составлена в соответствии с требованиями Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования – магистратура по направлению подготовки 18.04.01 Химическая технология (ФГОС ВО), рекомендациями Методической комиссии и накопленным опытом преподавания дисциплины кафедрой Химии и технологии биомедицинских препаратов РХТУ им. Д.И. Менделеева. Программа рассчитана на изучение дисциплины в течение одного семестра.

Дисциплина «Основы реакционной способности и механизмы реакций органических соединений» относится к дисциплинам по выбору части учебного плана, формируемой участниками образовательных отношений. Программа дисциплины предполагает, что обучающиеся имеют теоретическую и практическую подготовку в области общей, неорганической и органической химии, а также современных методов синтеза органических соединений.

Цель дисциплины – формирование у обучающихся систематизированных знаний о реакционной способности и механизмах реакций органических соединений, повышение научно-технической и методологической компетенций магистранта, необходимых для решения задач по синтезу биологически активных веществ.

Задачи дисциплины:

– формирование у обучающихся фундаментальной базы представлений о строении вещества как комплементарности трех термов: топологического, 3D и электронного, и взаимосвязи структуры со свойствами в соответствии с теорией химического строения органических соединений А.М. Бутлерова;

– формирование системных углубленных знаний в области реакционной способности и механизмов реакций органических соединений и выработка на основе этих знаний системного подхода к постановке, выполнению и анализу результатов научных исследований в области химии биологически активных веществ.

Дисциплина «Основы реакционной способности и механизмы реакций органических соединений» преподается в 1-м семестре. Контроль успеваемости студентов ведется по принятой в университете рейтинговой системе.

Рабочая программа дисциплины может быть реализована с применением электронных образовательных технологий и электронного обучения полностью или частично.

2. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Изучение дисциплины направлено на приобретение следующих **компетенций и индикаторов их достижения:**

Профессиональные компетенции и индикаторы их достижения:

Задача профессиональной деятельности	Объект или область знания	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК	Основание (профессиональный стандарт, анализ опыта) Обобщенные трудовые функции
Научно-исследовательский тип задач профессиональной деятельности				
\Выполнение фундаментальных и прикладных работ поискового, теоретического и экспериментального характера с целью определения технических характеристик новой техники, а также комплекса работ по разработке технологической документации.	Химическое, химико-технологическое производство Сквозные виды профессиональной деятельности в промышленности (в сфере организации и проведения научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ в области химического и химико-технологического производства).	ПК-2. Способен к поиску, обработке, анализу и систематизации научно-технической информации по теме исследования, выбору методик и средств решения задачи	ПК-2.1. Знает алгоритм поиска, оценки и анализа научно-технической информации; ПК-2.2. Умеет обобщать и систематизировать научно-техническую информацию; ПК-2.3. Владеет навыками соотнесения результатов собственной научной работы с отечественным и зарубежным опытом по тематике исследования.	Профессиональный стандарт 40.011 «Специалист по научно-исследовательским и опытно-конструкторским разработкам», утвержденный приказом Министерства труда и социальной защиты Российской Федерации от 04.03.2014 № 121 н, Обобщенная трудовая функция С. Проведение научно-исследовательских и опытно-конструкторских разработок. С /01.6. Осуществление научного руководства проведением исследований по отдельным задачам (уровень квалификации – 6).
		ПК-4 Способен проводить поисковые исследования инновационных технологических процессов в области биологически активных веществ	ПК-4.2 Умеет производить поисковые работы для разработки новых методов получения и анализа биологически активных веществ	
		ПК-5 Способен осуществлять самостоятельные научные исследования в области химии и технологии биологически активных веществ	ПК-5.1. Знает методы получения, особенности производства, свойства и механизмы действия биологически активных веществ различных классов; ПК-5.3. Умеет использовать теоретические знания по химии и технологии биологически активных веществ для решения конкретных задач научно-исследовательской деятельности;	

В результате изучения дисциплины студент магистратуры должен:

Знать:

- Теоретические основы реакционной способности органических соединений при получении биологически активных веществ;
- Теоретические основы теории механизмов органических реакций;
- Основы каталитических процессов в органическом синтезе.

Уметь:

- Найти известные в литературных источниках или предложить рациональные схемы синтеза новых органических веществ;
- Обосновывать эффективность способа синтеза органических веществ на основе теории механизмов органических реакций, выбирать и применять к предмету своего исследования соответствующие способы синтеза целевых биологически активных веществ.

Владеть:

- Теоретическими основами современных методов получения биологически активных веществ;
- Теоретическими основами каталитических процессов в органическом синтезе.

3. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Вид учебной работы	Объем дисциплины		
	ЗЕ	Акад. ч.	Астр. ч.
Общая трудоемкость дисциплины	4	144	108
Контактная работа – аудиторные занятия:	1,42	51	38,25
Лекции	0,47	17	12,75
Практические занятия	0,95	34	25,5
в том числе в форме практической подготовки	0,47	17	12,75
Самостоятельная работа	0,95	57	42,75
Самостоятельное изучение разделов дисциплины	1,58	57	42,75
Вид контроля:			
Экзамен	1	36	27
Контактная работа – промежуточная аттестация	1	0,4	0,3
Подготовка к экзамену.		35,6	26,7
Вид итогового контроля:	Экзамен		

4. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

4.1. Разделы дисциплины и виды занятий

№ п/п	Раздел дисциплины	Академ. часов					
		Всего	в т.ч. в форме пр. подг.	Лекции	Прак. зан.	в т.ч. в форме пр. подг.	Сам. работа
1	Раздел 1. Основные положения теоретической органической химии – теория химического строения органических соединений А.М. Бутлерова. Строение и количественное описание структуры молекул	19	6	3	6	6	10
2	Раздел 2. Природа и классификация связей в органической химии	31	11	5	11	11	15
3	Раздел 3. Взаимное влияние атомов в молекуле и реакционная способность	31	11	5	11	11	15
4	Раздел 4. Механизмы реакций. Классификация реакций в органической химии по их механизмам	27	6	4	6	6	17
	ИТОГО	108	34	17	34	34	57
	Экзамен	36	-	-	-	-	-
	ИТОГО	144	-	-	-	-	-

4.2 Содержание разделов дисциплины

Раздел 1. Основные положения теоретической органической химии – теория химического строения органических соединений А.М. Бутлерова. Строение и количественное описание структуры молекул.

Предмет и задачи теоретической органической химии. Связь структуры и свойств. Уравнения и процессы. Процесс как переход из одного состояния в другое. Два типа уравнений: уравнения, описывающие состояния; уравнения, описывающие процессы.

Точность уравнений: уравнения, описывающие динамическую систему, состоящую из трех или более тел, никогда не могут быть точными. Степень приближения (тем меньше, чем больше число элементов в системе). При переходе к макросистемам по числу участников, а химия имеет дело в абсолютном большинстве с макросистемами (число Авогадро или число молекул или атомов в моле вещества фантастически велико и основные представления теории вероятностей, выведенные из ограниченного числа попыток, становятся неуместными). Агрегатные состояния вещества и реакции. Вакансии в жидкости и оценка их энергии.

Структурная химия. Структура механическая и структура электронная. Связь строения органических соединений с реакционной способностью и свойствами вещества. Свойства органических веществ: качественные и количественные. Экстенсивные и интенсивные свойства. Аддитивность в описании свойств. Экстенсивные параметры. Проблема количественного описания реакционной способности органических соединений. Константа скорости и методы ее определения.

Теория химического строения органических соединений А.М. Бутлерова как основа построения фундаментальной зависимости структура-свойства. Современные теории и подходы к описанию взаимосвязи структура-свойство в химии, биохимии, медицинской химии. Используемые дескрипторы.

Раздел 2. Природа и классификация связей в органической химии.

Природа химической связи. Исторические аспекты: от Берцелиуса до Полинга. Характеристики связей. Классификация связей на основе представлений Полинга об электроотрицательности: ковалентные, ковалентные полярные и ионные. Недостатки теоретических воззрений об ионных связях. Критика представлений об электроотрицательности В. Хюккелем. Развитие представлений о строении атома. Волновое уравнение Шредингера и его решение для атома водорода. Атомные орбитали. Функции плотности вероятности. Метод валентных связей и концепция резонанса. Метод молекулярных орбиталей. Приближение МО-ЛКАО. Вариационный принцип определения энергии молекулярных орбиталей. Кулоновский и резонансный интегралы. Интегралы перекрывания. Рассмотрение молекулярного иона водорода. Орбитали связей σ - и π -типа. Индексы реакционной способности органических соединений, полученные в результате квантовохимических методов расчета.

Теория возмущений молекулярных орбиталей (ВМО) в органической химии. Одноцентровые возмущения. Внутримолекулярное и межмолекулярное связывание. Аддитивность возмущений. Альтернантные углеводороды и теорема парности.

Основные положения теории валентности. Валентные состояния атомов; гибридизация атомных орбиталей; типы гибридных орбиталей (sp^n и sp^{ndm}); связь межорбитального угла с характером орбиталей; качественная картина образования химических связей путем перекрывания атомных орбиталей; принцип максимального перекрывания орбиталей (самостоятельное повторение). Межорбитальные и валентные углы в напряженных циклах. Описание углерод-углеродных связей в циклопропане.

Классификация связей на основе теоремы Г. Гельмана-Феймана, как один из способов преодоления недостатков существующей классификации.

Раздел 3. Взаимное влияние атомов в молекуле и реакционная способность. Полярность ковалентных связей. Дипольные моменты связей и молекул. Шкала

электроотрицательностей Полинга и Малликена. Зависимость электроотрицательности атома углерода от его валентного состояния. Поляризуемость ковалентных связей. Индукционный механизм передачи влияния заместителей. Качественная оценка силы и направления индукционных эффектов заместителей. Эффект поля, его описание по Кирквуду-Вестхаймеру. Количественная оценка влияния заместителей на реакционную способность при индукционном механизме передачи влияния. Выбор индукционных констант заместителей по Тафту. Связь между строением заместителей и его индукционной константой. Уравнение Тафта. Оценка полярных эффектов по Робертсу и Мореленду. Сопряженный механизм передачи влияния заместителей. Правило винилологии и его объяснение. Качественная оценка силы и направления мезомерных эффектов. Характер влияния различных типов заместителей на распределение электронной плотности в бензольном ядре. Передача электронных эффектов заместителей через бензольное кольцо. Зависимость эффективности влияния от взаимного расположения заместителя и реакционного центра. Влияние пространственных препятствий копланарности заместителя М-типа и ароматического ядра на эффективность электронного влияния заместителя. Принцип полилинейности. Уравнение Гаммета и примеры его применения. Необходимость использования нескольких шкал σ -констант заместителей. Корреляционные соотношения $pK_a - \rho$ для модельных соединений лигнина. Принцип линейности свободных энергий (ЛСЭ). Термодинамический анализ уравнения Гаммета.

Теория двойных соударений. Теория активированного комплекса. Реакционный комплекс (реагенты и растворитель) как диссипативная структура Пригожина. Изокинетическое соотношение.

Раздел 4. Механизмы реакций. Классификация реакций в органической химии по их механизмам.

Общие принципы классификации механизмов органических реакций. Проблемы и алгоритм установления механизма. Классификация механизмов реакций на основе формализма тождественности последовательности стадий. Определение элементарной стадии. Реакции электрофильного присоединения по кратным связям $C=X$ ($X=C, N, O$) как пример рационального подхода к определению механизма реакции. Реакции электрофильного замещения в ароматическом кольце как частый случай электрофильного присоединения по $C=C$ -связи. Понятие об аллильном карбкатионе и вывод из распределения электронной плотности в аллильном катионе двух классов ориентантов: ориентанты первого и второго рода в ароматическом кольце.

Исследование механизмов реакций. Подход с позиций реакционной серии. Механизм передачи эффектов заместителей. Характеристика заместителей с точки зрения электронного влияния: индуктивный и мезомерный эффекты. Влияние среды на проявление эффекта заместителей. Инверсия реакционной способности при переходе от воды к органическим заместителям. Проблема использования pK диссоциации. Влияние ароматичности на стабилизацию промежуточных продуктов. Количественная оценка М- и I-эффектов заместителей на основе эмпирических данных. Индуктивные сигма-константы заместителей. Сигма-пара и сигма-мета константы заместителей в ароматическом ядре. Проблема орта-положения. Уравнение Гаммета. Реакционная константа и её численные значения. Роль реакционной константы в установлении механизма реакции. Уравнение Тафта.

Механизм электрофильного ароматического замещения S_E как аналог электрофильного присоединения к алифатическим двойным связям Ad_E . Механизм электрофильного присоединения к несопряженной π - $C=X$ ($X=C, O, N$)-связи. Электрофильные реагенты, способы получения и активации электрофильных реагентов. Активация кратной связи. Влияние М- и I-заместителей. Двухступенчатый механизм электрофильного присоединения – образование π - и σ -комплексов. Стабилизация σ -комплекса или карбкатиона, в том числе в случае изобутилена и родственных соединений

(замещение атома водорода). Правило Марковникова. Закономерности пространственного протекания электрофильного присоединения (транс-присоединение). Конкуренция нуклеофила и растворителя во второй стадии реакции. Сольватно-разделенные и контактные ионные пары. Присоединение к напряженным олефинам. Цис-продукты.

Особенности электрофильного присоединения по карбонильной группе. ВЗМО-орбитали карбонильной группы. Проблемы классификационного отнесения реакции присоединения. Лимитирующая стадия реакции и катализ реакции присоединения. Восстановление карбонильной группы гидридами металлов. Псевдонуклеофильные реакции присоединения к карбонильной группе.

Наиболее важные реакции электрофильного присоединения по π -C=C-связи:

Механизм электрофильного присоединения к сопряженным π -C=X (X=C, O, N)-связям. Электрофильное присоединение к сопряженным 1,3- π -связям C=X (X=C, O, N) как частный случай A_{DE} . Особенности присоединения. Стабилизация карбокатиона. Аллильный карбокатион. 1,4- и 1,2-присоединение. Диеновый синтез (реакция Дильса-Альдера).

5. СООТВЕТСТВИЕ СОДЕРЖАНИЯ ТРЕБОВАНИЙ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

№	В результате освоения дисциплины студент должен:		Раздел 1	Раздел 2	Раздел 3	Раздел 4
	Знать:					
1	– Теоретические основы реакционной способности органических соединений при получении биологически активных веществ;		+	+	+	+
2	– Теоретические основы теории механизмов органических реакций;				+	+
3	– Основы каталитических процессов в органическом синтезе.					+
	Уметь:					
4	– Найти известные в литературных источниках или предложить рациональные схемы синтеза новых органических веществ;					+
5	– Обосновывать эффективность способа синтеза органических веществ на основе теории механизмов органических реакций, выбирать и применять к предмету своего исследования соответствующие способы синтеза целевых биологически активных веществ.				+	+
	Владеть:					
6	– Теоретическими основами современных методов получения биологически активных веществ;		+	+	+	+
7	– Теоретическими основами каталитических процессов в органическом синтезе.					+
В результате освоения дисциплины студент должен приобрести следующие <i>профессиональные компетенции и индикаторы их достижения:</i>						
	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК				
8	ПК-2. Способен к поиску, обработке, анализу и систематизации научно-технической информации по теме исследования, выбору методик и средств решения задачи	ПК-2.1. Знает алгоритм поиска, оценки и анализа научно-технической информации;	+	+	+	+
		ПК-2.2. Умеет обобщать и систематизировать научно-техническую информацию;	+	+	+	+
		ПК-2.3. Владеет навыками соотнесения результатов собственной научной работы с отечественным и зарубежным опытом по тематике исследования.	+	+	+	+

9	ПК-4 Способен проводить поисковые исследования инновационных технологических процессов в области биологически активных веществ	ПК-4.2 Умеет производить поисковые работы для разработки новых методов получения и анализа биологически активных веществ				+
10	ПК-5 Способен осуществлять самостоятельные научные исследования в области химии и технологии биологически активных веществ	ПК-5.1. Знает методы получения, особенности производства, свойства и механизмы действия биологически активных веществ различных классов;		+	+	+
		ПК-5.3. Умеет использовать теоретические знания по химии и технологии биологически активных веществ для решения конкретных задач научно-исследовательской деятельности;	+	+	+	+

6. ПРАКТИЧЕСКИЕ И ЛАБОРАТОРНЫЕ ЗАНЯТИЯ

6.1. Практические занятия

Примерные темы практических занятий по дисциплине.

№ п/п	№ раздела дисциплины	Темы практических занятий	Часы
1	1	Связь строения органических соединений с реакционной способностью и свойствами вещества. Свойства органических веществ: качественные и количественные. Экстенсивные и интенсивные свойства. Аддитивность в описании свойств. Экстенсивные параметры. Проблема количественного описания реакционной способности органических соединений. Константа скорости и методы ее определения. Теория химического строения органических соединений А.М.Бутлерова как основа построения фундаментальной зависимости структура-свойства. Современные теории и подходы к описанию взаимосвязи структура-свойство в химии, биохимии, медицинской химии. Используемые дескрипторы.	6
2	2	Природа химической связи. Исторические аспекты: от Берцелиуса до Полинга. Характеристики связей. Классификация связей на основе представлений Полинга об электроотрицательности: ковалентные, ковалентные полярные и ионные. Развитие представлений о строении атома. Волновое уравнение Шредингера и его решение для атома водорода. Функции плотности вероятности. Метод валентных связей и концепция резонанса. Метод молекулярных орбиталей. Приближение МО-ЛКАО. Вариационный принцип определения энергии молекулярных орбиталей. Кулоновский и резонансный интегралы. Теория возмущений молекулярных орбиталей (ВМО) в органической химии. Основные положения теории валентности. Валентные состояния атомов; гибридизация атомных орбиталей. Классификация связей на основе теоремы Г.Гельмана-Феймана, как один из способов преодоления недостатков существующей классификации.	11
3	3	Полярность ковалентных связей. Дипольные моменты связей и молекул. Шкала электроотрицательностей Полинга и Маллиkena. Количественная оценка влияния заместителей на реакционную способность при индукционном механизме передачи влияния. Выбор индукционных констант заместителей по Тафту.	11

		Связь между строением заместителей и его индукционной константой. Уравнение Тафта. Оценка полярных эффектов по Робертсу и Мореленду. Сопряженный механизм передачи влияния заместителей. Правило винилологии и его объяснение. Качественная оценка силы и направления мезомерных эффектов. Характер влияния различных типов заместителей на распределение электронной плотности в бензольном ядре. Передача электронных эффектов заместителей через бензольное кольцо. Зависимость эффективности влияния от взаимного расположения заместителя и реакционного центра. Влияние пространственных препятствий копланарности заместителя М-типа и ароматического ядра на эффективность электронного влияния заместителя. Принцип полилинейности. Уравнение Гаммета и примеры его применения. Необходимость использования нескольких шкал σ-констант заместителей. Корреляционные соотношения $\rho_K - \rho$ для модельных соединений лигнина. Принцип линейности свободных энергий (ЛСЭ). Термодинамический анализ уравнения Гаммета. Теория двойных соударений. Теория активированного комплекса. Реакционный комплекс (реагенты и растворитель) как диссипативная структура Пригожина. Изокинетическое соотношение.	
4	4	Общие принципы классификации механизмов органических реакций. Проблемы и алгоритм установления механизма. Классификация механизмов реакций на основе формализма тождественности последовательности стадий. Определение элементарной стадии. Исследование механизмов реакций. Подход с позиций реакционной серии. Механизм передачи эффектов заместителей. Характеристика заместителей с точки зрения электронного влияния: индуктивный и мезомерный эффекты. Реакции электрофильного присоединения. Механизм электрофильного ароматического замещения. Особенности электрофильного присоединения по карбонильной группе. Наиболее важные реакции электрофильного присоединения по π-C=C-связи. Электрофильное присоединение к сопряженным 1,3- π-связям.	6

7. САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА

Самостоятельная работа проводится с целью углубления знаний по дисциплине и предусматривает:

- ознакомление и проработку рекомендованной литературы, работу с электронно-библиотечными системами, включая переводы публикаций из научных журналов, цитируемых в базах Scopus, Web of Science, Chemical Abstracts, РИНЦ;
- участие в семинарах РХТУ им. И. Менделеева по тематике дисциплины;
- подготовку к выполнению контрольных работ по материалу лекционного курса;
- подготовку реферата по индивидуальной тематике;
- подготовку к сдаче экзамена по дисциплине.

Планирование времени на самостоятельную работу, необходимого на изучение дисциплины, студентам лучше всего осуществлять на весь период изучения, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала. Материал, законспектированный на лекциях, необходимо регулярно дополнять сведениями из литературных источников, представленных в рабочей программе. При работе с указанными источниками рекомендуется составлять краткий конспект материала, с обязательным фиксированием библиографических данных источника.

8. ПРИМЕРЫ ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ КОНТРОЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Совокупная оценка по дисциплине складывается из оценок за выполнение контрольных работ (максимальная оценка 40 баллов), реферата (максимальная оценка 20 баллов) и итогового контроля в форме экзамена (максимальная оценка 40 баллов).

8.1. Примерная тематика реферативно-аналитической работы.

Примерный перечень тем рефератов:

1. Явление затухающей осцилляции свойств в гомологических рядах
2. Топологические представления в органической химии. Теория графов.
3. Современные представления о структуре и классификации химической связи.
4. Современное состояние теории химического строения А.М. Бутлерова. Вклад российских химиков в развитие теории.
5. Новая химия Шилова.
6. История развития электронных представлений в органической химии. От Берцелиуса до наших дней.
7. Моменты инерции и их использование в современной химии
8. Моменты инерции алканов и галогенпроизводных алканов. Вычисления и использования.
9. Моменты инерции в корреляционном анализе.
10. Моменты инерции в теории химического строения органических соединений
11. Использование моментов инерции в прогнозировании физико-химических свойств органических соединений.
12. Составляющие главной статистической суммы и их использование в органической химии при описании свойств.
13. Современные представления о механизме реакций электрофильного ароматического замещения. Соотношение селективностей Стока-Брауна.
14. Современные представления о механизме реакций нуклеофильного ароматического замещения.

15. Ионные пары в реакциях нуклеофильного замещения в алифатическом ряду.
Каталитические и солевые эффекты.
16. Электрофильное присоединение к алкенам и метод молекулярных орбиталей.
17. Современные представления о механизме реакций отщепления, диаграммы О'Ферола.
18. Молекулярные перегруппировки в свете общих принципов органической химии.
19. Квантово-химическое описание радикальных перегруппировок.
20. Проблема неклассических карбокатионов.

8.2. Примеры контрольных вопросов для текущего контроля освоения дисциплины

Для текущего контроля предусмотрено 3 контрольных работы: контрольная работа №1 по разделам 1 и 2 (максимальная оценка – 15 баллов), контрольная работа №2 по разделу 3 (максимальная оценка – 15 баллов) и контрольная работа №3 по разделу 4 (максимальная оценка – 10 баллов).

Раздел 1-2. Примеры вопросов к контрольной работе № 1. Максимальная оценка – 15 баллов. Контрольная работа содержит 3 вопроса, по 5 баллов за вопрос.

1. Предмет и задачи теоретической органической химии.
2. Связь структуры и свойств.
3. Уравнения и процессы. Процесс как переход из одного состояния в другое.
4. Два типа уравнений: уравнения, описывающие состояния и уравнения, описывающие процессы.
5. Агрегатные состояния вещества и реакции. Вакансии в жидкости и оценка их энергии.
6. Структурная химия. Структура механическая и структура электронная.
7. Связь строения органических соединений с реакционной способностью и свойствами вещества.
8. Свойства органических веществ: качественные и количественные. Экстенсивные и интенсивные свойства.
9. Аддитивность в описании свойств.
10. Экстенсивные параметры.
11. Проблема количественного описания реакционной способности органических соединений.
12. Константа скорости и методы ее определения.
13. Константа скорости каталитической реакции.
14. Проблемы количественного описания структуры молекулы.
15. Обходные пути решения проблемы взаимосвязи структуры и свойств органических соединений.
16. Взаимосвязь структура – физические (интенсивные свойства) – реакционная способность (кинетические свойства).
17. Теория химического строения органических соединений А.М. Бутлерова как основа построения фундаментальной зависимости структура-свойства.
18. Современные теории и подходы к описанию взаимосвязи структура-свойство в химии, биохимии, медицинской химии. Используемые дескрипторы.
19. Три типа дескрипторов для описания химического строения органических соединений как следствие теории А.М. Бутлерова и построение регрессионных уравнений, связывающих взаимосвязь структуры и свойства.
20. 1 D-дескрипторы. Топологический подход как один из способов количественного описания структуры молекул.

21. Использование топологии для количественного описания структуры молекул. Теоретико-множественная топология: Структурная формула → граф → теория графов → топологический индекс молекулы → количественная характеристика молекулы.
22. Молекулярные графы и матрицы (матрицы расстояний и матрицы смежности). Топологические индексы. Индекс Винера. Расчет индекса Винера.
23. Примеры использования индекса Винера для решения и практических задач органической химии: как дескриптора при количественном описании структуры;
24. Построение зависимостей структура-свойство или структура-активность;
25. Предсказание направления взаимодействия или Принцип наименьшего изменения структуры (ПНИС) на примере правила В. Марковникова.
26. Кинетический и термодинамический контроль реакции и ПНИС.
27. Три степени свободы и их реализация в зависимости от агрегатного состояния вещества.
28. Оси вращения и энергия вращательного движения, как фактор, определяющий свойства и реакционную способность в жидкой фазе.
29. Момент инерции вращательного движения (J) как численная характеристика пространственной структуры молекулы органического соединения.
30. Расчет момента инерции вращательного движения. Зависимости структура-свойства при использовании момента инерции как дескриптора описания структуры.
31. Причины разбиения гомологических рядов алканов и их производных на два ряда – с четным и нечетным числом атомов углерода.
32. Причина выпадения из зависимостей первых членов гомологических рядов.
33. Четные и нечетные производные в природе. Явление затухающей осцилляции свойств в гомологических рядах и его природа.
34. $J_w = MW^{2/3}$ – как характеристика момента инерции вращательного движения.
35. Свойства веществ как функция характеристики момента инерции вращательного движения.
36. Связь характеристики момента инерции вращательного движения с физико-химическими, термодинамическими и кинетическими свойствами вещества.
37. Дескрипторы электронной структуры органических соединений.
38. Потенциалы ионизации (ПИ) и сродство к электрону (СЭ) как численные характеристики электронного строения органических соединений или электронные дескрипторы структуры.
39. Методы определения ПИ и СЭ.
40. Фотоэлектронная спектроскопия и теорема Купманса.
41. Теория МО. ВЗМО и НСМО, и их использование при описании реакционной способности).

Раздел 3. Примеры вопросов к контрольной работе № 2. Максимальная оценка – 15 баллов. Контрольная работа содержит 3 вопроса, по 5 баллов за вопрос.

1. Произведите сопоставление орбиталей π -связей в молекулах этилена, пропилена и изобутилена.
2. Какие отличия в строении ВЗМО и НСМО наблюдаются у указанных соединений.
3. Объясните понятия «зарядовый контроль» и «орбитальный контроль». Приведите примеры реакций.
4. Схематично изобразите относительное расположение энергетических уровней орбиталей π -связей изобутилена и ацетона. В чем проявляется их сходство и различие?
5. Найдите индекс Винера продуктов присоединения HCl к пропилену по правилу Марковникова и против правила. Соблюдается ли принцип наименьшего изменения структуры А.М.Бутлерова?

6. Роль пи-комплексов в электрофильном присоединении по кратным связям $C=C$ и $C=O$. Приведите примеры образования пи-комплексов.
7. Приведите механизм реакции Вильямсона.
8. Природа химической связи. Исторические аспекты: от Берцелиуса до Полинга. (Самостоятельное повторение; в лекциях отдельные комментарии по некоторым вопросам).
9. Характеристики связей.
10. Классификация связей на основе представлений Полинга об электроотрицательности: ковалентные, ковалентные полярные и ионные.
11. Недостатки теоретических воззрений об ионных связях. Критика представлений об электроотрицательности В.Хюккелем.
12. Метод валентных связей и концепция резонанса. Теория возмущений молекулярных орбиталей (ВМО) в органической химии.
13. Основные положения теории валентности. Межорбитальные и валентные углы в напряженных циклах;
14. Описание углерод-углеродных связей в циклопропане. Соединения с "инвертированной» тетраэдральной геометрией.
15. Классификация связей на основе теоремы Г.Гельмана-Феймана, как один из способов преодоления недостатков существующей классификации.
16. Три вида связей: вид водорода или H-H,
17. Вид H-Элемент (два типа), вид Э-Э (три типа).
18. Анализ геминальных и вицинальных взаимодействий на основе представлений о центроидах заряда.

Раздел 4. Примеры вопросов к контрольной работе № 3. Максимальная оценка – 10 баллов. Контрольная работа содержит 2 вопроса, по 5 баллов за вопрос.

1. Представления о взаимном влиянии атомов в молекулах – от Бутлерова и Марковникова до А.Н. Верещагина и наших дней.
2. Полярность ковалентных связей. Дипольные моменты связей и молекул.
3. Индукционный механизм передачи влияния заместителей. Качественная оценка силы и направления индукционных эффектов заместителей. Эффект поля и его описание.
4. Количественная оценка влияния заместителей на реакционную способность при индукционном механизме передачи влияния.
5. Выбор индукционных констант заместителей по Тафту. Связь между строением заместителей и его индукционной константой.
6. Уравнение Тафта.
7. Характер влияния различных типов заместителей на распределение электронной плотности в бензольном ядре. Передача электронных эффектов заместителей через бензольное кольцо.
8. Зависимость эффективности влияния от взаимного расположения заместителя и реакционного центра. Влияние пространственных препятствий копланарности заместителя М-типа и ароматического ядра на эффективность электронного влияния заместителя. Принцип полилинейности.
9. Уравнение Гаммета и примеры его применения. Необходимость использования нескольких шкал σ -констант заместителей.
10. Принцип линейности свободных энергий (ЛСЭ). Термодинамический анализ уравнения Гаммета.
11. Теория двойных соударений.
12. Недостатки ТДС: несоответствие экспериментальным данным, не учитывает структуру и трансформацию структуры молекул в ходе взаимодействия, нельзя рассчитать предэкспоненциальный фактор.

13. Проблема учета влияния растворителя.
14. Теория активированного комплекса (теория абсолютных скоростей реакций, теория переходного состояния).
15. История создания ТАК (Эйринг, Эванс, Поляни). Основные положения ТАК Степени свободы.
16. Состояния и статистические суммы: большая и малые статистические суммы.
17. Поступательные, вращательные и колебательные малые статистические суммы и уравнения их выражения.
18. Основы ИК-спектроскопии.
19. Недостатки и ограничения ТАК.
20. Реакционный комплекс (реагенты и растворитель) как диссипативная структура Пригожина. Потоки энтропии. Колебание энтропии в реакционном комплексе.
21. Основное уравнение теории реакционного комплекса как диссипативной структуры Пригожина.
22. Изокинетическое соотношение. Изокинетическая температура.
23. Изоэнтальпийные и изоэнтальпийные серии, изоэнтальпийно-изоэнтальпийные серии.
24. Кинетический компенсационный эффект.
25. Способы определения изокинетической температуры.
26. Траектория реакционной способности молекул в изоэнтальпийной области.
27. Ограниченность представлений классической теоретической органической химии
28. Поверхности потенциальных энергий

8.3. Вопросы для итогового контроля освоения дисциплины (1 семестр – экзамен)

Экзаменационный билет включает контрольные вопросы по всем разделам рабочей программы дисциплины и содержит 2 вопроса по 20 баллов.

1. Зависимости структура-свойства
2. Вращательное движение и его характеристики. Моменты инерции вращательного движения как дескриптор количественного описания пространственного строения молекулы.
3. Эффект сверхсопряжения или гиперконъюгации.
4. Гош-эффект, аномерный эффект.
5. Соотношение молекула-вещество и уровни химической организации материи: - атомный уровень (ковалентный и Ван-дер-Ваальсов радиусы, электроотрицательность), молекулярный уровень (основное и возбужденное состояния), супрамолекулярный или надмолекулярный (ассоциаты, самоассоциация и самоорганизация с т.з. энтальпии и энтропии, молекулярная биология как раздел супрамолекулярной химии).
4. Факторы, определяющие реакционную способность органических соединений. Теория двойных соударений
6. Свойства молекул: физические и химические; индивидуальные и коллигативные. Свойства количественные и качественные. Свойства вещества интенсивные и экстенсивные
7. Факторы, определяющие реакционную способность органических соединений. Теория активированного комплекса или переходного состояния.
8. Индуктивный эффект и проблема передачи электронного влияния по сигма связям. Соотношение между Фельд-эффектом и индукцией по связям. Индуктивные сигма константы в алифатическом ряду на примере 4-Х-бицикло[2.2.2]октанкарбоновой кислоты. Соотношение ЛСЭ как основа использования сигма-констант в химии.

- структуры, молекулярной формулы, межмолекулярных взаимодействиях) и их информационное содержание.
31. Статсуммы и сечение реакции.
 32. Зарядно и орбитально контролируемые реакции.
 33. Топологический подход и топологические индексы в описании первичной структуры. Индексы Винера и их вычисление. Корреляционная взаимосвязь индекса Винера и свойств молекулы и вещества. Примеры расчетов. Особенности описания гомологических рядов четных и нечетных алканов и их производных. Дополнение принципа гомологичности.
 34. Орбитально контролируемые реакции. Перициклические реакции. Реакция Дильса-Альдера. Нейтральный диеновый синтез. Энергия стабилизации
 35. Термы химического строения: топологические (1D), пространственные (3D), электронные. Количественная характеристика термов.
 36. Топологический подход и топологические индексы в описании первичной структуры. Индексы Винера и их вычисление. Корреляционная взаимосвязь индекса Винера и свойств молекулы и вещества. Примеры расчетов. Особенности описания гомологических рядов четных и нечетных алканов и их производных. Дополнение принципа гомологичности.
 37. Орбитально контролируемые реакции. Перициклические реакции. Реакция Дильса-Альдера. Нейтральный диеновый синтез. Энергия стабилизации.

Фонд оценочных средств приведен в виде отдельного документа, являющегося неотъемлемой частью основной образовательной программы.

8.4. Структура и примеры билетов для экзамена

Экзамен по дисциплине «Основы реакционной способности и механизмы реакций органических соединений» проводится в 1 семестре и включает контрольные вопросы по всем разделам рабочей программы дисциплины. Билет для экзамена состоит из 2-х вопросов, относящихся к указанным разделам.

Пример билета для экзамена:

«Утверждаю» Зав. каф. ХТБМП _____ М.С. Ощепков «__» _____ 20__ г.	Министерство науки и высшего образования РФ
	Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева
	Кафедра химии и технологии биомедицинских препаратов
	18.04.01 Химическая технология
	Магистерская программа – «Химия и технология биологически активных веществ»
«Основы реакционной способности и механизмы реакций органических соединений»	
Билет № 1	
1. Соотношение молекула-вещество и уровни химической организации материи: - атомный уровень (ковалентный и Ван-дер-Ваальсов радиусы, электроотрицательность), молекулярный уровень (основное и возбужденное состояния), супрамолекулярный или надмолекулярный (ассоциаты, самоассоциация и самоорганизация с т.з. энтальпии и энтропии, молекулярная биология как раздел супрамолекулярной химии). 2. Орбитально контролируемые реакции. Перициклические реакции. Реакция Дильса-Альдера. Нейтральный диеновый синтез. Энергия стабилизации.	

9. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

9.1. Рекомендуемая литература.

А. Основная литература

1. Лебедев Н.Н., Манаков М.Н., Швец В.Ф. Теория химических процессов основного органического и нефтехимического синтеза. М., Химия, 1984. (Базовый учебник).
2. Травень В. Ф. Органическая химия: учебник для вузов; в 3 т. / В. Ф. Травень. - М.: БИНОМ Лаборатория знаний, 2004. (Базовый учебник).

Б. Дополнительная литература

1. К.Ингольд. Теоретические основы химии. М.: Мир. 1973. С.213
2. Дж.Марч. Органическая химия. М.: Мир. 1987. т.1. С.270
3. В.А.Пальм. Введение в теоретическую органическую химию. Учеб. Пособие для ун-тов. М.: Высш. школа. 1974. с.220
4. В.Ф. Травень. Электронная структура и свойства органических молекул. М.: Химия, 1989.

9.2. Рекомендуемые источники научно-технической информации

Научно-технические журналы:

- «Журнал Органической химии», ISSN: 0514-7492
- «Журнал Общей химии», ISSN: 0044-460X
- «Известия РАН, серия химическая», ISSN: 0002-3353
- «Успехи химии», ISSN: 0042-1308
- «Кристаллография», ISSN: 0023-4761
- «Химическая промышленность сегодня», ISSN: 0023-110X
- «Tetrahedron», ISSN: 0040-4020
- «Tetrahedron Letters», ISSN: 0040-4039
- «Tetrahedron: Asymmetry», ISSN: 0957-4166
- «Journal of Crystal Growth», ISSN: 0022-0248
- «Mendeleev Communication», ISSN: 0959-9436
- «Chirality», ISSN: 0899-0042
- «Stereochemistry», ISSN: 1024-2430
- «Journal of Organic Chemistry», ISSN: 0022-3263
- «Journal of the American Chemistry Society», ISSN: 0002-7863
- «European Journal of Organic Chemistry», ISSN: 1099-069
- <http://webbook.nist.gov/chemistry/> - база данных Национального института стандартизации и технологии США по свойствам соединений;
- http://riodb01.ibase.aist.go.jp/sdbs/cgibin/direct_frame_top.cgi/ - База данных Национального института современной индустриальной науки и технологии, Япония.

10. ПЕРЕЧЕНЬ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ В ОБРАЗОВАТЕЛЬНОМ ПРОЦЕССЕ

Информационную поддержку изучения дисциплины осуществляет Информационно-библиотечный центр (ИБЦ) РХТУ им. Д.И. Менделеева, который обеспечивает обучающихся основной учебной, учебно-методической и научной литературой, необходимой для организации образовательного процесса по дисциплине. Общий объем многоотраслевого фонда ИБЦ на 01.01.2024 г. составляет 1 559 436 экз.

Фонд ИБЦ располагает учебной, учебно-методической и научно-технической литературой в форме печатных и электронных изданий, а также включает официальные, справочно-библиографические, специализированные отечественные и зарубежные периодические и информационные издания. ИБЦ обеспечивает доступ к профессиональным базам данных, информационным, справочным и поисковым системам.

Каждый обучающийся обеспечен свободным доступом из любой точки, в которой имеется доступ к сети Интернет и к электронно-библиотечной системе (ЭБС) Университета, которая содержит различные издания по основным изучаемым дисциплинам и сформирована по согласованию с правообладателями учебной и учебно-методической литературы.

Для более полного и оперативного справочно-библиографического и информационного обслуживания в ИБЦ реализована технология Электронной доставки документов.

Полный перечень электронных информационных ресурсов, используемых в процессе обучения, представлен в основной образовательной программе.

11. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

В соответствии с учебным планом занятия по дисциплине «Основы реакционной способности и механизмы реакций органических соединений» проводятся в форме лекций, практических занятий и самостоятельной работы обучающегося.

11.1. Оборудование, необходимое в образовательном процессе:

Лекционная учебная аудитория, оборудованная электронными средствами демонстрации (компьютер со средствами звуковоспроизведения, проектор, экран) и учебной мебелью.

11.2. Учебно-наглядные пособия:

Иллюстрации и наглядные 3D-модели к разделам лекционного курса и практическим занятиям; графики и таблицы, иллюстрирующие лекционный материал.

11.3. Компьютеры, информационно-телекоммуникационные сети, аппаратно-программные и аудиовизуальные средства:

Персональные компьютеры в аудитории для самостоятельной подготовки обучающихся, укомплектованные принтерами и программными средствами; проекторы и экраны; цифровые камеры; копировальные аппараты; локальная сеть с выходом в Интернет.

11.4. Печатные и электронные образовательные и информационные ресурсы:

Электронные образовательные ресурсы: электронные презентации к разделам лекционного курса; учебно-методические разработки в электронном виде.

11.5. Перечень лицензионного программного обеспечения:

№ п/п	Наименование программного продукта	Реквизиты договора поставки	Примечание	Срок окончания действия лицензии
1.	Micosoft Office Standard 2013	Контракт № 62-64ЭА/2013 от 02.12.2013	Лицензия на ПО, принимающее участие в образовательных процессах.	бессрочная
2.	Microsoft Office Professional Plus 2019 В составе: Word, Excel, Power Point, Outlook, OneNote, Access, Publisher, InfoPath	Контракт № 28-35ЭА/2020 от 26.05.2020	Лицензия на ПО, принимающее участие в образовательных процессах.	12 месяцев (ежегодное продление подписки с правом перехода на обновлённую версию продукта)
3.	Kaspersky Endpoint Security для бизнеса – Стандартный Russian Edition.	Контракт № 90-133ЭА/2021 от 07.09.2021	Лицензия на ПО, не принимающее прямого участия в образовательных процессах (инфраструктурное/вспомогательное ПО)	12 месяцев (ежегодное продление подписки с правом перехода на обновлённую версию продукта)
4.	«Антиплагиат.ВУЗ 5.0»	Контракт от 08.05.2024 №34-523К/2024	Лимит проверок 10 000	19.05.2025

12. ТРЕБОВАНИЯ К ОЦЕНКЕ КАЧЕСТВА ОСВОЕНИЯ ПРОГРАММЫ

Наименование разделов	Основные показатели оценки	Формы и методы контроля и оценки
Раздел 1. Основные положения теоретической органической химии – теория химического строения органических соединений А.М. Бутлерова. Строение и количественное описание структуры молекул	<i>Знает:</i> – Теоретические основы реакционной способности органических соединений при получении биологически активных веществ; <i>Владеет:</i> – Теоретическими основами современных методов получения биологически активных веществ;	Оценка за контрольную работу №1 Оценка за реферат Оценка за экзамен
Раздел 2. Природа и классификация связей в органической химии	<i>Знает:</i> – Теоретические основы реакционной способности органических соединений при получении биологически активных веществ; <i>Владеет:</i> – Теоретическими основами современных методов получения биологически активных веществ;	Оценка за контрольную работу №1 Оценка за реферат Оценка за экзамен

Раздел 3. Взаимное влияние атомов в молекуле и реакционная способность	<i>Знает:</i> – Теоретические основы реакционной способности органических соединений при получении биологически активных веществ; – Теоретические основы теории механизмов органических реакций; <i>Умеет:</i> – Обосновывать эффективность способа синтеза органических веществ на основе теории механизмов органических реакций, выбирать и применять к предмету своего исследования соответствующие способы синтеза целевых биологически активных веществ. <i>Владет:</i> – Теоретическими основами современных методов получения биологически активных веществ;	Оценка за контрольную работу №2 Оценка за реферат Оценка за экзамен
Раздел 4. Механизмы реакций. Классификация реакций в органической химии по их механизмам	<i>Знает:</i> – Теоретические основы реакционной способности органических соединений при получении биологически активных веществ; – Теоретические основы теории механизмов органических реакций; – Основы каталитических процессов в органическом синтезе. <i>Умеет:</i> – Найти известные в литературных источниках или предложить рациональные схемы синтеза новых органических веществ; – Обосновывать эффективность способа синтеза органических веществ на основе теории механизмов органических реакций, выбирать и применять к предмету своего исследования соответствующие способы синтеза целевых биологически активных веществ. <i>Владет:</i> – Теоретическими основами современных методов получения биологически активных веществ; – Теоретическими основами каталитических процессов в органическом синтезе.	Оценка за контрольную работу №3 Оценка за реферат Оценка за экзамен

13. ОСОБЕННОСТИ ОРГАНИЗАЦИИ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО ПРОЦЕССА ДЛЯ ИНВАЛИДОВ И ЛИЦ С ОГРАНИЧЕННЫМИ ВОЗМОЖНОСТЯМИ ЗДОРОВЬЯ

Обучение инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья осуществляется в соответствии с:

- Порядком организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры (Приказ Министерства науки и высшего образования Российской Федерации от 06.04.2021 № 245);

- Положением о порядке организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева», принятым решением Ученого совета РХТУ им. Д.И. Менделеева от 28.12.2022, протокол № 5;

- Методическими рекомендациями по организации образовательного процесса для обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья в образовательных организациях высшего образования, в том числе оснащенности образовательного процесса (утверждены заместителем Министра образования и науки РФ А.А. Климовым от 08.04.2014 № АК-44/05вн).

**Дополнения и изменения к рабочей программе дисциплины
«Основы реакционной способности и механизмы реакций органических соединений»**

**основной образовательной программы
по направлению подготовки 18.04.01 Химическая технология,
магистерская программа – «Химия и технология биологически активных веществ»**

Форма обучения: **очная**

Номер изменения/ дополнения	Содержание дополнения/изменения	Основание внесения изменения/дополнения
1.		протокол заседания Ученого совета №_____от «___»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «___»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «___»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «___»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «___»_____20__г.

**Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Российский химико-технологический университет
имени Д.И. Менделеева»**

«УТВЕРЖДЕНО»
на заседании Ученого совета
РХТУ им. Д.И. Менделеева
протокол № 1 от «29» августа 2024 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

«Патологическая биохимия»

Направление подготовки 18.04.01 Химическая технология

**Магистерская программа:
«Химия и технология биологически активных веществ»**

Квалификация «магистр»

Москва 2024

Программа составлена на кафедре Химии и технологии биомедицинских препаратов.
Авторы программы: к.х.н., доцент Соловьева И.Н., к.х.н., доцент Поливанова А.Г., к.х.н.,
доцент Ткаченко С.В.

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры Химии и технологии биомедицинских препаратов «16» апреля 2024 г., протокол №7.

1. ЦЕЛЬ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ

Программа составлена в соответствии с требованиями Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования – магистратура по направлению подготовки **18.04.01 Химическая технология** (ФГОС ВО), рекомендациями Методической комиссии и накопленным опытом преподавания дисциплины кафедрой Химии и технологии биомедицинских препаратов РХТУ им. Д.И. Менделеева. Программа рассчитана на изучение дисциплины в течение одного семестра.

Дисциплина «Патологическая биохимия» относится к общей части дисциплин учебного плана, формируемой участниками образовательных отношений. Программа дисциплины предполагает, что обучающиеся имеют теоретическую и практическую подготовку в области химии и технологии биологически активных веществ.

Цель дисциплины – научить студентов разбираться в причинах возникновения патологий человеческого организма на молекулярном и тканевом уровне, в биохимических и молекулярных механизмах протекания патологических реакций, способах поддержания гомеостаза организмом и его защитных механизмах, направленных против внешних и внутренних патогенных факторов.

Задачи дисциплины:

- формирование у магистрантов фундаментальной базы и системных знаний об основных молекулярных и биохимических механизмах протекания патологических процессов в организме;
- выработка системного подхода к постановке, выполнению и анализу результатов научных исследований в области изучения механизмов действия биологически активных веществ на организм человека.

Дисциплина «Патологическая биохимия» преподается в 1-м семестре. Контроль успеваемости студентов ведется по принятой в университете рейтинговой системе.

Рабочая программа дисциплины может быть реализована с применением электронных образовательных технологий и электронного обучения полностью или частично.

2. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Изучение дисциплины направлено на приобретение следующих **компетенций и индикаторов их достижения:**

Профессиональные компетенции и индикаторы их достижения:

Задача профессиональной деятельности	Объект или область знания	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК	Основание (профессиональный стандарт, анализ опыта) Обобщенные трудовые функции
Научно-исследовательский тип задач профессиональной деятельности				
Выполнение фундаментальных и прикладных работ поискового, теоретического и экспериментального характера с целью определения технических характеристик новой техники, а также комплекса работ по разработке технологической документации.	Химическое, химико-технологическое производство Сквозные виды профессиональной деятельности в промышленности (в сфере организации и проведения научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ в области химического и химико-технологического производства).	ПК-2. Способен к поиску, обработке, анализу и систематизации научно-технической информации по теме исследования, выбору методик и средств решения задачи	ПК-2.1. Знает алгоритм поиска, оценки и анализа научно-технической информации; ПК-2.2. Умеет обобщать и систематизировать научно-техническую информацию;	Профессиональный стандарт 40.011 «Специалист по научно-исследовательским и опытно-конструкторским разработкам», утвержденный приказом Министерства труда и социальной защиты Российской Федерации от 04.03.2014 № 121 н, Обобщенная трудовая функция С. Проведение научно-исследовательских и опытно-конструкторских разработок. С /01.6. Осуществление научного руководства проведением исследований по отдельным задачам (уровень квалификации – 6).
		ПК-5 Способен осуществлять самостоятельные научные исследования в области химии и технологии биологически активных веществ	ПК-5.2. Знает теоретические основы функционирования живых организмов в норме и при патологии, необходимые для осуществления научных исследований по химии биологически активных веществ.	

В результате изучения дисциплины студент магистратуры должен:

Знать:

- Современные научные достижения и перспективные направления работ в области патологических биохимических реакций;
- Современные химические, физико-химические, фотохимические, кинетические и термодинамические, механические представления о патологическом протекании биохимических процессов и возможностях их корректировки;
- Основные типы, механизмы и предпосылки развития патобиохимических процессов.

Уметь:

- Проводить анализ научной литературы в области современных исследований в области патологической биохимии;
- Формулировать возможные механизмы поражения организма при нарушении биохимических процессов в клетках разных тканей;
- Применять теоретические знания по нормальной и патологической биохимии для выбора возможных биомаркеров для лечения заболеваний или купирования негативного состояния организма, сопутствующего им.

Владеть:

- Методами работы с научной, справочной литературой и электронно-библиотечными ресурсами по основам патологической биохимии и исследований в этой области;
- Методологическими подходами, позволяющими выявлять взаимосвязи между нарушениями биохимических реакций на уровне субклеточных структур и их проявлениями на уровне организма;
- Методами критического анализа и оценки современных научных достижений в области патологической биохимии, генерирования новых идей при решении исследовательских и практических задач в данной области;
- Способностью и готовностью к разработке новых подходов к воздействию на потенциальные биомаркеры для лечения заболеваний или купирования негативного состояния организма.

3. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Вид учебной работы	Объем дисциплины		
	ЗЕ	Акад. ч.	Астр. ч.
Общая трудоемкость дисциплины	3	108	81
Контактная работа – аудиторные занятия:	1,42	51	38,25
Лекции	0,95	34	25,5
Практические занятия	0,47	17	12,75
в том числе в форме практической подготовки	0,47	17	12,75
Самостоятельная работа	1,58	57	42,75
Контактная самостоятельная работа	1,58	0,4	0,3
Самостоятельное изучение разделов дисциплины		56,6	42,45
Вид итогового контроля:	Зачет с оценкой		

4. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ
4.1. Разделы дисциплины и виды занятий

№ п/п	Раздел дисциплины	Академ. часов					
		Всего	в т.ч. в форме пр. подг.	Лекции	Прак. зан.	в т.ч. в форме пр. подг.	Сам. работа
1.	Молекулярная патобиохимия клетки.	30	4	10	4	4	16
1.1	Введение в молекулярную патобиохимию и патофизиологию.	7	1	2	1	1	4
1.2	Патофизиология клеточных структур	8	1	3	1	1	4
1.3	Биоинформационная патология	8	1	3	1	1	4
1.4	Нарушения контроля качества и распределения молекул в клетке	7	1	2	1	1	4
2.	Патология молекулярных систем управления клеточными процессами	41	6	12	6	6	23
2.1	Общее представление о механизмах управления клеточными процессами с помощью химических сигналов	7	1	2	1	1	4
2.2	Механизмы внутриклеточной сигнализации и их патологии	14	2	4	2	2	8
2.3	Управление процессами размножения и дифференцировки клеток	14	2	4	2	2	8
	Механизмы гибели клеток	6	1	2	1	1	3
3.	Биохимия иммунитета	25	5	8	5	5	12
3.1	Клеточные и молекулярные механизмы иммунитета	14	3	4	3	3	7
3.2	Молекулярные механизмы патогенного проявления иммунитета	11	2	4	2	2	5
4.	Патофизиология нейронов. Структурно-функциональная организация нервных клеток.	12	2	4	2	2	6
	ИТОГО	108	17	34	17	17	57

4.2 Содержание разделов дисциплины

Раздел 1. Молекулярная патобиохимия клетки.

1.1. Введение в молекулярную патобиохимию и патофизиологию. Место патофизиологии в системе знаний. Предмет патофизиологии. Категории патофизиологии: норма, здоровье, предболезнь, болезнь. Разделы патофизиологии. Типовые патологические процессы и типовые молекулярно-клеточные реакции. Основные принципы жизнедеятельности, нарушение которых приводит к патологии.

1.2. Патофизиология клеточных структур. Патология клеточных мембран. Патологии клеточного ядра. Патология митохондрий. Патология мышечных элементов клетки. Патология лизосом. Патология эндоплазматического ретикулума. Нарушения липидного обмена в клетке. Нарушения обмена коллагена. Внутри- и внеклеточный отек.

1.3. Биоинформационная патология. Геном человека. Генетическая обусловленность патологических процессов. Мутагены и мутации. Основные этапы процесса передачи генетической информации. Классификация мутаций: качественные и количественные изменения в генетическом аппарате и связанные с ними патологии. Наследственные и врожденные болезни. Подходы к лечению наследственных заболеваний. Моногенные и полигенные заболевания. Мутации митохондриальной ДНК и связанные с этим патологии. Роль продуктов мутантных генов в патогенезе наследственных болезней.

1.4. Нарушения контроля качества и распределения молекул в клетке. Репликация ДНК, молекулярные механизмы обеспечения и контроля качества этого процесса. Проблема недорепликации ДНК. Теломеразная теория старения и рака. Структура и молекулярные особенности работы теломеразы. Заболевания, связанные с нарушением уровня экспрессии гена теломеразы. Дефекты репарации ДНК. Основные типы репарационных процессов. Заболевания, связанные с дефектами процесса репарации. Вспомогательные молекулярные факторы репарации. Контроль качества молекул в ходе трансляции. Молекулярный механизм работы амноацил-тРНК-синтетаз. Основные молекулярные факторы, участвующие в процессе инициации, цикле элонгации и терминации биосинтеза белков. Патологические нарушения трансляционных процессов. Посттрансляционные процессы. Транспорт белков в клетке. Контроль качества фолдинга и посттрансляционных модификаций белков в эндоплазматическом ретикулуме и аппарате Гольджи. Транспорт белков в митохондрии и контроль качества фолдинга митохондриальных белков. Шапероны и энергозависимые протеазы. Механизм упорядоченного складывания белком шаперонами. Протеазный путь деградации белковых молекул. Белки теплового шока. Болезни, обусловленные неправильным свертыванием белков. Этиология и патогенез прионных заболеваний.

Раздел 2. Патология молекулярных систем управления клеточными процессами.

2.1. Общее представление о механизмах управления клеточными процессами с помощью химических сигналов. Механизм управления функциями организма. Основные молекулярные элементы теории управления внутриклеточными процессами. Способы межклеточного взаимодействия. Каскады сигналов управления. Гипоталамо-гипофизарная система управления.

2.2. Механизмы внутриклеточной сигнализации и их патологии. Патологии лигандов: патологические изменения, связанные с изменением количества лиганда (сахарный диабет 1-го типа, паркинсонизм), патологии, связанные с присутствием ложного лиганда, патологии взаимодействия лигандов с рецепторами плазматических мембран. Типы клеточных рецепторов. Сахарный диабет 2-го типа. Аденилатциклазная система управления: основные молекулярные элементы и их взаимосвязь, механизм управления активностью аденилатциклазы, принцип действия Протеинкиназы А и основные типы активируемых ею белков. Патологии аденилатциклазной системы.

Наркотическая зависимость и алкоголизм как патологии молекулярных систем управления клеточными процессами. Стимулирующие наркотические средства. Опиаты. Особенности кальциевой регуляции внутриклеточных процессов. Кальциевая перегрузка. Кальциевая регуляция быстрых процессов. Фосфоинозитидный регуляторный каскад. Участие инозитолтрифосфата и кальций-регулируемых кальциевых каналов в происхождении внутриклеточных колебаний концентрации кальция. Метаболизм инозитолтрифосфата. Патологии фосфоинозитидного регуляторного каскада. Роль оксида азота (NO) в регуляции физиологических и патологических процессов. Основные Особенности оксида азота как биогенного вещества. Синтез NO в организме. Физиологические эффекты оксида азота, обусловленные работой конститутивных NO-синтаз. Физиологические эффекты оксида азота, обусловленные работой индуцибельной NO-синтазы. Патогенные эффекты NO на организм.

2.3. Управление процессами размножения и дифференцировки клеток. Регуляция размножения и роста клеток. Особенности митогенного сигнального каскада. Клеточный цикл. Регуляция клеточного цикла. Особенности тормозных белков клеточного цикла. Онкогенез. Роль мутаций в развитии опухоли. Этиология онкологических заболеваний. Патогенез онкологических заболеваний. Стадии опухолевого патогенеза. Роль белка p53 в опухолевом росте. Особенности раковых клеток. Классификация опухолей. Вирусный онкогенез. Подходы к лечению опухолевых заболеваний.

2.4. Механизмы гибели клеток. Формы клеточной гибели: апоптоз и некроз. Морфологические и биохимические признаки апоптоза. Сигнальные каскады апоптоза: внеклеточная и внутриклеточная активация. Заболевания, обусловленные нарушениями регуляции апоптоза. Морфологические и биохимические признаки некроза. Этиология некроза: кальциевая перегрузка, оксидативный стресс, нарушение барьерной функции мембран. Патогенетические схемы некроза. Особенности некроза клеток при ишемии.

Раздел 3. Биохимия иммунитета.

3.1. Клеточные и молекулярные механизмы иммунитета. Клетки и органы иммунной системы. Врожденный иммунитет. Клеточные элементы врожденного иммунитета. Гуморальные факторы врожденного иммунитета. Недостатки врожденного иммунитета. Приобретенный иммунитет. Антитела и антигены. Структура и классификация антител. Механизмы возникновения разнообразия антител. Взаимодействие клеток иммунной системы. Цитотоксическое действие Т-клеток.

3.2. Молекулярные механизмы патогенного проявления иммунитета. Молекулярные механизмы формирования воспалительной реакции. Основные симптомы острого воспаления. Медиаторы воспаления. Процесс миграции лейкоцитов в очаг воспаления. Фагоцитоз. Патогенное действие острой воспалительной реакции на организм. Патогенные проявления иммунитета. Иммунодефициты. Аутоиммунные заболевания. Гиперчувствительность (аллергия). Патогенез аллергии. Типы гиперчувствительности: гиперчувствительность I типа (аллергия), гиперчувствительность II типа (цитотоксическая реакция), гиперчувствительность III типа (повреждение иммунными комплексами), гиперчувствительность IV типа («клеточный иммунитет»).

4. Патофизиология нейронов. Структурно-функциональная организация нервных клеток.

Метаболические особенности нейрона. Роль NMDA-рецепторов в процессах эксайтотоксичности. Патологии межмембранного транспорта ионов в нейронах. Каналопатии. Эпилепсии. Устройство и механизм работы различных типов синапсов. Патологии синапсов. Нейродегенеративные болезни: болезнь Альцгеймера, хорея Гентингтона, болезнь Паркинсона.

5. СООТВЕТСТВИЕ СОДЕРЖАНИЯ ТРЕБОВАНИЙ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

№	В результате освоения дисциплины студент должен:	Раздел 1	Раздел 2	Раздел 3	Раздел 4
	Знать:				
1	– Современные научные достижения и перспективные направления работ в области патологических биохимических реакций;	+	+	+	+
2	– Современные химические, физико-химические, фотохимические, кинетические и термодинамические, механические представления о патологическом протекании биохимических процессов и возможностях их корректировки;	+	+	+	+
3	– Основные типы, механизмы и предпосылки развития патофизиологических процессов.	+	+	+	+
	Уметь:				
4	– Проводить анализ научной литературы в области современных исследований в области патологической биохимии;	+	+	+	+
5	– Формулировать возможные механизмы поражения организма при нарушении биохимических процессов в клетках разных тканей;	+	+	+	+
6	– Применять теоретические знания по нормальной и патологической биохимии для выбора возможных биомаркеров для лечения заболеваний или купирования негативного состояния организма, сопутствующего им.	+	+	+	+
	Владеть:				
7	– Методами работы с научной, справочной литературой и электронно-библиотечными ресурсами по основам патологической биохимии и исследований в этой области;	+	+	+	+
8	– Методологическими подходами, позволяющими выявлять взаимосвязи между нарушениями биохимических реакций на уровне субклеточных структур и их проявлениями на уровне организма;	+	+	+	+
9	– Методами критического анализа и оценки современных научных достижений в области патологической биохимии, генерирования новых идей при решении исследовательских и практических задач в данной области;	+	+	+	+
10	– Способностью и готовностью к разработке новых подходов к воздействию на потенциальные биомаркеры для лечения заболеваний или купирования негативного состояния организма.	+	+	+	+

В результате освоения дисциплины студент должен приобрести следующие <i>профессиональные компетенции и индикаторы их достижения:</i>						
	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК				
11	ПК-2. Способен к поиску, обработке, анализу и систематизации научно-технической информации по теме исследования, выбору методик и средств решения задачи	ПК-2.1. Знает алгоритм поиска, оценки и анализа научно-технической информации;	+	+	+	+
		ПК-2.2. Умеет обобщать и систематизировать научно-техническую информацию;	+	+	+	+
12	ПК-5 Способен осуществлять самостоятельные научные исследования в области химии и технологии биологически активных веществ	ПК-5.2. Знает теоретические основы функционирования живых организмов в норме и при патологии, необходимые для осуществления научных исследований по химии биологически активных веществ.	+	+	+	+

6. ПРАКТИЧЕСКИЕ И ЛАБОРАТОРНЫЕ ЗАНЯТИЯ

6.1. Практические занятия

Примерные темы практических занятий по дисциплине.

№ п/п	№ раздела дисциплины	Темы практических занятий	Часы
1	1	Типовые патологические процессы и типовые молекулярно-клеточные реакции	1
2		Основные принципы жизнедеятельности, нарушение которых приводит к патологии	1
3		Репликация, транскрипция, трансляция: механизмы и возможные нарушения. Мутации, моногенные и полигенные заболевания. Подходы к лечению наследственных заболеваний. Фермент теломеразы. Механизмы репарации ДНК, заболевания, непосредственно связанные с нарушением процессов репарации генов	1
4		Молекулярные механизмы обеспечения контроля качества структуры белков в процессе трансляции и фолдинга; патологии, связанные с нарушением этих процессов. Белковый транспорт в норме и патологии	1
5	2	Патологии клеточных лигандов. Патологии рецепторов	1
6		Аденилатциклазная система управления и ее патологии. Роль аденилатциклазной системы управления в формировании наркотической зависимости	1
7		Кальций-зависимые регуляторные каскады и их патологии	1
8		Управление процессами размножения и дифференцировки клеток. Основные подходы к лечению онкологических заболеваний.	2
9		Механизмы гибели клеток: апоптоз, некроз	1
10	3	Клеточные и молекулярные механизмы иммунной системы	1
		Механизмы развития воспалительной реакции. Иммунотоксичность: типы иммунотоксических процессов.	2
11		Молекулярные механизмы патогенного проявления иммунитета: аутоиммунные заболевания, иммунодефициты, гиперчувствительность.	2
12	4	Структурно-функциональная организация нервных клеток. Метаболические особенности нейрона. Патологические состояния нейронов: ишемия, эпилепсия. Патология синаптической передачи. Нейродегенеративные заболевания.	2

7. САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА

Самостоятельная работа проводится с целью углубления знаний по дисциплине и предусматривает:

- ознакомление и проработку рекомендованной литературы, работу с электронно-библиотечными системами, включая переводы публикаций из научных журналов, цитируемых в базах Scopus, Web of Science, Chemical Abstracts, РИНЦ;
- регулярную проработку пройденного на лекциях и практических занятиях учебного материала и подготовку к выполнению контрольных работ по разделам курса;

- подготовку реферата по тематике курса на основе проработки рекомендованной литературы и работы с электронно-библиотечными системами;
- посещение отраслевых выставок, семинаров, конгрессов, конференций различного уровня по профилю дисциплины;
- участие в семинарах РХТУ им. И. Менделеева по тематике изучаемой дисциплины или смежных дисциплин;
- подготовку к сдаче зачета с оценкой по дисциплине.

Планирование времени на самостоятельную работу, необходимого на изучение дисциплины, студентам лучше всего осуществлять на весь период изучения, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала. Материал, законспектированный на лекциях, необходимо регулярно дополнять сведениями из литературных источников, представленных в рабочей программе. При работе с указанными источниками рекомендуется составлять краткий конспект материала, с обязательным фиксированием библиографических данных источника.

8. ПРИМЕРЫ ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ КОНТРОЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Совокупная оценка по дисциплине складывается из оценок за выполнение контрольных работ (максимальная оценка 40 баллов), за подготовку реферата (максимальная оценка 20 баллов) и итогового контроля в форме зачета с оценкой (максимальная оценка 40 баллов).

8.1. Примерная тематика реферативно-аналитической работы.

1. Значение ионов K^+ , Na^+ , Mg^{2+} , Ca^{2+} и микроэлементов в организме человека. Причины и механизмы нарушения ионного гомеостаза. Патологические состояния и болезни, связанные с нарушением ионного гомеостаза.
2. Энтероклостридиозы человека.
3. Основные медикаментозные подходы к лечению раковых заболеваний. Протеинкиназы, как мишени для лечения онкологических процессов.
4. Патологические проявления тромбоза. Антикоагулянтные препараты.
5. Авитаминозы. Цинга, бери-бери, рахит, пеллагра.
6. Нейродегенеративные заболевания. Болезнь Альцгеймера.
7. Патологии, связанные с нарушением транспорта ионов меди и железа. Болезнь Вильсона-Коновалова, ацерулоплазминемию, болезнь Менкеса.
8. Прионные заболевания.
9. Патогенные проявления иммунитета. Аллергия.
10. Нейродегенеративные заболевания. Паркинсонизм.
11. Сахарный диабет.
12. Гомоцистеинемия. Медикаментозные подходы к лечению.
13. Нарушение углеводного обмена при наследственных ферментопатиях.
14. Гипо-, гиперфункция щитовидной железы.
15. Роль Fe^{2+} в организме. Железодефицитные состояния.
16. Воспаление. Формирование в эволюции, острая воспалительная реакция и иммунитет.
17. Этиология и патогенез мышечных атрофий.
18. Этиология и патогенез пигментной склеродермы.
19. Энзимопатии. Оксалоз, Пропионовая ацидемия, синдром Лоу.
20. Нейродегенеративные заболевания. Болезнь Гентингтона (хорея Гентингтона).
21. Патогенные проявления иммунитета. Иммунодефициты.

22. Патогенные проявления иммунитета. Аутоиммунные заболевания. Аутоиммунная гемолитическая анемия.
23. Нарушение обмена кальция в организме. Гиперкальциемия и гипокальциемия.
24. Ишемия: причины возникновения, особенности патогенеза.
25. Митохондриальные заболевания.
26. Вирусный онкогенез.
27. Физиологические эффекты оксида азота (II). Роль оксида азота (II) в патологических процессах: ишемии, инфекционном поражении, воспалении, раке.
28. Биологическая роль кальция. Остеопороз.
29. Теломераза и старение. Патологии, обусловленные нарушением уровня экспрессии гена теломеразы.
30. Патологии транспортных белков. Аминоацидурии.
31. Общая характеристика анемий. Серповидноклеточная и наследственная гемолитическая анемия.
32. Общая характеристика энзимопатий. Фенилкетонурия, болезнь Тея-Сакса, болезнь Кэнэвэн.
33. Общая характеристика энзимопатий. Гемофилия, порфирии.
34. Стресс эндоплазматического ретикулума как типовой молекулярно-клеточный патологический процесс различных заболеваний.
35. Коллагенопатии.
36. Патологии аденилатциклазной системы.
37. Гиперхолистеринемия (Гиперлипидемия).
38. Муковисцидоз (кистозный фиброз поджелудочной железы).
39. Различия биохимических процессов про- и эукариотических организмов как основа избирательности действия лекарственных средств.
40. Различия в клеточной архитектуре как основа избирательности действия БАВ. Цитологические аспекты противоопухолевой и иммунотерапии.
41. Химиотерапия: история и принципы. Современные подходы к химиотерапии.
42. Химиотерапия: вклад П. Эрлиха. Химиотерапевтический индекс. Группы химиотерапевтических средств. Проблемы резистентности.
43. Концепция антиметаболитов как аналогов коферментов и субстратов ферментов, обладающих антагонистическим действием.
44. Наркомания. Классификация. Основные клинические проявления при различных видах наркомании. Патогенез нарушений. Механизм токсического действия.
45. Механизмы фототоксичности и избирательность. Фотодинамическая терапия.
46. Регуляция окисления жирных кислот. Индукция окислительного стресса. Хиноны и их роль.
47. Последствия окислительного стресса для организма. Окислительное повреждение ДНК, белков, липидов.
48. Химический канцерогенез. Характеристика канцерогенов, классификация. Стадии канцерогенеза и механизмы действия. Выявление канцерогенной активности веществ. Оценка риска химического канцерогенеза.
49. Антибиотики: история открытия, основные группы. Молекулярные механизмы действия. Проблемы современной антибиотикотерапии.
50. Иммунотоксичность. Характеристика иммунной системы в норме и патологии.
51. Иммунотоксичность. Иммуносупрессия, реакции гиперчувствительности. Аутоиммунные процессы.
52. Причины уязвимости нервной системы. Характеристика нейрохимических процессов в норме и патологии.
53. Проявления нейротоксических процессов на уровне организма. Патологии нейронов.

8.2. Примеры контрольных вопросов для текущего контроля освоения дисциплины

Для текущего контроля предусмотрено 2 контрольных работы (по одной контрольной работе по 1-2 и 3-4 разделу соответственно). Максимальная оценка за контрольные работы 1 и 2 составляет 20 баллов за каждую.

Раздел 1. Примеры вопросов к контрольной работе № 1. Контрольная работа содержит 2 вопроса, по 10 баллов за вопрос.

Вопрос 1.1.

1. Основные понятия патологической биохимии. Предмет курса.
 2. Место патофизиологии в системе знаний. Предмет патофизиологии.
 3. Категории и разделы патофизиологии.
 4. Основные принципы жизнедеятельности, нарушение которых приводит к патологии.
 5. Введение в молекулярную патофизиологию. Патофизиология клеточных структур.
 6. Типовые молекулярно-клеточные патологические реакции (общая характеристика).
 7. Основные понятия генетики: генотип, фенотип, геном, хромосомы, гены, аллели, экспрессия гена, доминантные и рецессивные признаки, соматические и половые клетки, мутации.
 8. Подробное строение наследственного вещества – от нуклеотида до хромосомы.
 9. Этапы передачи генетической информации.
 10. Мутации и мутагены. Классификация мутаций.
 11. Патологические проявления мутаций (примеры заболеваний).
 12. Моногенные и полигенные заболевания. Общая характеристика.
 13. Наследственные и врожденные болезни (общая характеристика, примеры заболеваний).
 14. Подходы к лечению наследственных заболеваний.
 15. Роль продуктов мутантных генов в патогенезе наследственных заболеваний.
 16. Механизм репликации ДНК; причина недорепликации.
 17. Фермент теломераза: структура, функции, патологии при нарушении уровня экспрессии.
 18. Теломераза как биомишень для воздействия лекарственными препаратами.
 19. Характеристика основных репарационных процессов.
 20. Этиология и патогенез пигментной ксеродермии.
 21. Основные участники процесса трансляции, устройство активного центра рибосомы.
 22. Фермент аминоацил-тРНК-синтетаза (структура и химизм осуществляемых превращений, контроль качества процесса активации аминокислот при подготовке к трансляции).
 23. Биосинтез белка на рибосомах.
 24. Этапы трансляции и трансляционные факторы.
- Молекулярные биомишени для нарушения процесса трансляции.

Вопрос 1.2.

1. Необходимость регуляции процессов жизнедеятельности. Способы межклеточного взаимодействия. Основные элементы цепи регулирования, их назначение и взаимосвязь; привести примеры конкретных биомолекул из различных регуляторных каскадов.
2. Особенности сигнальных веществ и их значение в системе управления клеточными функциями. Классификация лигандов по строению и типу

- управляемых рецепторов; приведите примеры структур конкретных лигандов из каждой группы. Общая схема действия липофильных сигнальных молекул.
3. Особенности сигнальных веществ и их значение в системе управления клеточными функциями. Классификация лигандов по строению и типу управляемых рецепторов; приведите примеры структур конкретных лигандов из каждой группы. Общая схема действия гидрофильных агонистов и нейротрансмиттеров.
4. Классификация основных видов патологий лигандов. Этиология и патогенез двух видов недостаточности инсулина.
5. Классификация основных видов патологий лигандов. Этиология и патогенез заболевания связанного с недостаточностью дофамина. Этиология и патогенез заболеваний, связанных с присутствием «ложных лигандов».
6. Характеристики и особенности рецепторов. Классификация рецепторов по локализации, структуре и механизму действия. Особенности механизмов действия внутриклеточных рецепторов. Этиология и патогенез «почечного несахарного диабета».
7. Классификация рецепторов по структуре и механизму действия. Ионотропные и метаботропные рецепторы. Основные типы патологий рецепторов. Этиология и патогенез инсулинорезистентности, обусловленной нарушением работы клеточных рецепторов.
8. Классификация рецепторов по структуре и механизму действия. Основные типы патологий рецепторов. Этиология и патогенез рецепторопосредованной недостаточности андрогенов. На примере данной группы заболеваний показать связь различных вариантов локализации мутации в гене рецептора с нарушением конкретных молекулярных механизмов, обеспечивающих его эффективное функционирование.
9. Аденилатциклазная система управления: общая схема, активирующие факторы и молекулярные выключатели каскада. Протеинкиназа А: структура, активация, локализация, функции и основные мишени.
10. Структура и подробная классификация G-белков. Подробный механизм активации аденилатциклазы G-белками, «молекулярные выключатели» данного процесса. Реакция образования цАМФ, его значимость в цепи управления функциями клеток и молекулярные мишени.
11. Основные виды патологических состояний, связанных с нарушением выработки цАМФ и патогенные факторы, которые их вызывают. Характеристика патологических состояний аденилатциклазной системы, вызванных действием бактериальных токсинов: холерного, коклюшного и токсина сибирской язвы.
12. Особенности Ca^{2+} как вторичного посредника. Механизмы регуляции концентрации свободного Ca^{2+} в цитоплазме. Молекулярные мишени Ca^{2+} как вторичного посредника.
13. Особенности Ca^{2+} как вторичного посредника и его молекулярные мишени. Механизм кальциевой регуляции быстрых процессов. Общие причины и патогенетические последствия кальциевой перегрузки.
14. Фосфоинозитидный регуляторный каскад: особенности, общая схема работы, механизмы инактивации, схема образования вторичных посредников. Механизм формирования колебаний концентрации кальция в цитоплазме посредством активации фосфоинозитидного каскада, особенности этих процессов и управляемых ими физиологических функций.
15. Особенности Ca^{2+} как вторичного посредника и его молекулярные мишени. Причины вызывающие кальциевую перегрузку в случае болезни Альцгеймера и при ишемии, патогенез этих процессов.

16. Особенности оксида азота (II) как участника физиологических процессов. Пути синтеза оксида азота (II) в организме. NO-синтазы: классификация, особенности строения, механизм синтеза оксида азота (II).
17. Особенности оксида азота (II) как участника физиологических процессов. Основные мишени NO. Механизмы активации конститутивной NO-синтазы в эндотелиальных клетках. Механизм NO-опосредованной регуляции тонуса кровеносных сосудов.
18. Основные мишени NO в организме. Физиологические эффекты оксида азота (II), обусловленные работой индуцибельной NO-синтазы. Патогенное действие NO на организм.
19. Митогенный сигнальный каскад: особенности строения и работы основных элементов, «молекулярные выключатели», регулируемые каскадом физиологические функции.
20. Клеточный цикл: характеристика стадий, контрольных пунктов и молекулярных регуляторов.
21. Особенности регуляции клеточного цикла циклин-зависимыми протеинкиназами. Динамика образования и деградации циклинов по ходу клеточного цикла. Физиологические функции и мишени белков-супрессоров: p21, p27, p53. Роль белка p53 в опухолевом процессе.
22. Морфологические и биохимические признаки апоптоза. Пути активации регуляторных каскадов апоптоза и основные причины активации этого процесса в клетках. Рецепторопосредованный апоптоз.
23. Морфологические и биохимические признаки апоптоза. Пути активации регуляторных каскадов апоптоза и основные причины активации этого процесса в клетках. Внутриклеточная сигнализация апоптоза.
24. Некроз: морфологические и биохимические признаки. Основные патогенетические составляющие процесса.
25. Роль мутаций в развитии опухоли. Основные типы мутаций в онкогенезе: характеристика, примеры биомишеней и эффектов при нарушении их работы, примеры конкретных видов опухолей для каждого типа мутаций.
26. Роль мутаций в развитии опухоли. Основные типы мутаций в онкогенезе: характеристика, примеры биомишеней. Роль белка p53 в опухолевом процессе.
27. Роль мутаций в развитии опухоли. Основные типы мутаций в онкогенезе: характеристика, примеры биомишеней. Вирусный онкогенез.

Раздел 2. Примеры вопросов к контрольной работе № 2. Контрольная работа содержит 2 вопроса, по 10 баллов за вопрос.

Вопрос 2.1.

1. Иммунная система. Строение, органы, клетки, функции иммунной системы.
2. Классификация клеток иммунной системы, их особенности и выполняемые функции.
3. Иммуитет. Система HLA (MHC). Классы HLA, строение, процессирование и презентация антигена. Иммунологическая роль.
4. Иммуитет. Система комплемента: состав, пути активации. Иммунологическое действие.
5. Пути активации комплемента: классический и альтернативный.
6. Врождённый иммуитет: виды, рецепторы, связь с приобретённым иммуитетом.
7. Приобретённый иммуитет: виды, эффекторы. Антитела, адаптивный иммунный ответ.
8. Строение, виды и функции антител.

9. Классификация патологических иммунных реакций по Джеллу и Кумбсу. Механизмы возникновения и осуществления реакций гиперчувствительности 1-3-го типов.
10. Механизмы клеточно-опосредованной гиперчувствительности 4-го типа.
11. Патогенные проявления иммунитета. Индукция и нарушение толерантности. Иммунодефициты. Механизмы аутоиммунных реакций.
12. Воспаление: физиологический смысл, симптомы. Медиаторы воспаления.
13. Воспаление. Механизм миграции лейкоцитов, фагоцитоз.

Вопрос 2.2.

1. Метаболические особенности нейрона. Патогенез ишемии клеток мозга, вызванной инсультом.
2. Основные стадии процесса передачи нервного импульса. Этиология различных видов эпилепсии.
3. Синапс. Нейромедиаторы. Роль нейромодуляторов в работе синапса.
4. Патологии синаптической передачи.
5. Характеристика нейродегенеративных заболеваний. Болезнь Альцгеймера. хорея Гентингтона.
6. Характеристика нейродегенеративных заболеваний. Хорея Гентингтона.
7. Характеристика нейродегенеративных заболеваний. Болезнь Паркинсона.

8.3. Вопросы для итогового контроля освоения дисциплины (1 семестр – зачет с оценкой).

Билет для зачета с оценкой включает контрольные вопросы по всем разделам рабочей программы дисциплины и содержит 4 вопроса, каждый из которых оценивается по 10 баллов.

1. Основные принципы жизнедеятельности, нарушение которых приводит к патологии.
2. Введение в молекулярную патофизиологию. Патофизиология клеточных структур.
3. Типовые молекулярно-клеточные патологические реакции (общая характеристика).
4. Основные понятия генетики: генотип, фенотип, геном, хромосомы, гены, аллели, экспрессия гена, доминантные и рецессивные признаки, соматические и половые клетки, мутации.
5. Подробное строение наследственного вещества – от нуклеотида до хромосомы.
6. Этапы передачи генетической информации.
7. Мутации и мутагены. Классификация мутаций.
8. Патологические проявления мутаций (примеры заболеваний).
9. Моногенные и полигенные заболевания. Общая характеристика.
10. Наследственные и врожденные болезни (общая характеристика, примеры заболеваний).
11. Подходы к лечению наследственных заболеваний.
12. Роль продуктов мутантных генов в патогенезе наследственных заболеваний.
13. Механизм репликации ДНК; причина недорепликации.
14. Фермент теломераза: структура, функции, патологии при нарушении уровня экспрессии.
15. Теломераза как биомаркер для воздействия лекарственными препаратами.
16. Характеристика основных репарационных процессов.
17. Этиология и патогенез пигментной ксеродермии.

18. Основные участники процесса трансляции, устройство активного центра рибосомы. Фермент аминоксил-тРНК-синтетаза (структура и химизм осуществляемых превращений, контроль качества процесса активации аминокислот при подготовке к трансляции).

19. Этапы трансляции и трансляционные факторы. Молекулярные биомеханизмы для нарушения процесса трансляции.

20. Необходимость регуляции процессов жизнедеятельности. Способы межклеточного взаимодействия. Основные элементы цепи регулирования, их назначение и взаимосвязь; привести примеры конкретных биомолекул из различных регуляторных каскадов.

21. Особенности сигнальных веществ и их значение в системе управления клеточными функциями. Классификация лигандов по строению и типу управляемых рецепторов; приведите примеры структур конкретных лигандов из каждой группы. Общая схема действия липофильных сигнальных молекул.

22. Особенности сигнальных веществ и их значение в системе управления клеточными функциями. Классификация лигандов по строению и типу управляемых рецепторов; приведите примеры структур конкретных лигандов из каждой группы. Общая схема действия гидрофильных агонистов и нейротрансмиттеров.

23. Классификация основных видов патологий лигандов. Этиология и патогенез двух видов недостаточности инсулина.

24. Классификация основных видов патологий лигандов. Этиология и патогенез заболевания связанного с недостаточностью дофамина. Этиология и патогенез заболеваний, связанных с присутствием «ложных лигандов».

25. Характеристики и особенности рецепторов. Классификация рецепторов по локализации, структуре и механизму действия. Особенности механизмов действия внутриклеточных рецепторов. Этиология и патогенез «почечного несахарного диабета».

26. Классификация рецепторов по структуре и механизму действия. Ионотропные и метаботропные рецепторы. Основные типы патологий рецепторов. Этиология и патогенез инсулинорезистентности, обусловленной нарушением работы клеточных рецепторов.

27. Классификация рецепторов по структуре и механизму действия. Основные типы патологий рецепторов. Этиология и патогенез рецепторопосредованной недостаточности андрогенов. На примере данной группы заболеваний показать связь различных вариантов локализации мутации в гене рецептора с нарушением конкретных молекулярных механизмов, обеспечивающих его эффективное функционирование.

28. Аденилатциклазная система управления: общая схема, активирующие факторы и молекулярные выключатели каскада. Протеинкиназа А: структура, активация, локализация, функции и основные мишени.

29. Структура и подробная классификация G-белков. Подробный механизм активации аденилатциклазы G-белками, «молекулярные выключатели» данного процесса. Реакция образования цАМФ, его значимость в цепи управления функциями клеток и молекулярные мишени.

30. Основные виды патологических состояний, связанных с нарушением выработки цАМФ и патогенные факторы, которые их вызывают. Характеристика патологических состояний аденилатциклазной системы, вызванных действием бактериальных токсинов: холерного, коклюшного и токсина сибирской язвы.

31. Особенности Ca^{2+} как вторичного посредника. Механизмы регуляции концентрации свободного Ca^{2+} в цитоплазме. Молекулярные мишени Ca^{2+} как вторичного посредника.

32. Особенности Ca^{2+} как вторичного посредника и его молекулярные мишени. Механизм кальциевой регуляции быстрых процессов. Общие причины и патогенетические последствия кальциевой перегрузки.

33. Фосфоинозитидный регуляторный каскад: особенности, общая схема работы, механизмы инактивации, схема образования вторичных посредников. Механизм формирования колебаний концентрации кальция в цитоплазме посредством активации фосфоинозитидного каскада, особенности этих процессов и управляемых ими физиологических функций.
34. Особенности Ca^{2+} как вторичного посредника и его молекулярные мишени. Причины вызывающие кальциевую перегрузку в случае болезни Альцгеймера и при ишемии, патогенез этих процессов.
35. Особенности оксида азота (II) как участника физиологических процессов. Пути синтеза оксида азота (II) в организме. NO-синтазы: классификация, особенности строения, механизм синтеза оксида азота (II).
36. Особенности оксида азота (II) как участника физиологических процессов. Основные мишени NO. Механизмы активации конститутивной NO-синтазы в эндотелиальных клетках. Механизм NO-опосредованной регуляции тонуса кровеносных сосудов.
37. Основные мишени NO в организме. Физиологические эффекты оксида азота (II), обусловленные работой индуцибельной NO-синтазы. Патогенное действие NO на организм.
38. Митогенный сигнальный каскад: особенности строения и работы основных элементов, «молекулярные выключатели», регулируемые каскадом физиологические функции.
39. Клеточный цикл: характеристика стадий, контрольных пунктов и молекулярных регуляторов.
40. Особенности регуляции клеточного цикла циклин-зависимыми протеинкиназами. Динамика образования и деградации циклинов по ходу клеточного цикла. Физиологические функции и мишени белков-супрессоров: p21, p27, p53. Роль белка p53 в опухолевом процессе.
41. Морфологические и биохимические признаки апоптоза. Пути активации регуляторных каскадов апоптоза и основные причины активации этого процесса в клетках. Рецепторопосредованный апоптоз.
42. Морфологические и биохимические признаки апоптоза. Пути активации регуляторных каскадов апоптоза и основные причины активации этого процесса в клетках. Внутриклеточная сигнализация апоптоза.
43. Некроз: морфологические и биохимические признаки. Основные патогенетические составляющие процесса.
44. Роль мутаций в развитии опухоли. Основные типы мутаций в онкогенезе: характеристика, примеры биомишеней и эффектов при нарушении их работы, примеры конкретных видов опухолей для каждого типа мутаций.
45. Роль мутаций в развитии опухоли. Основные типы мутаций в онкогенезе: характеристика, примеры биомишеней. Роль белка p53 в опухолевом процессе.
46. Роль мутаций в развитии опухоли. Основные типы мутаций в онкогенезе: характеристика, примеры биомишеней.
47. Вирусный онкогенез.
48. Иммунная система. Строение, органы, клетки, функции иммунной системы.
49. Классификация клеток иммунной системы, их особенности и выполняемые функции.
50. Иммуитет. Система HLA (MHC). Классы HLA, строение, процессирование и презентация антигена. Иммунологическая роль.
51. Иммуитет. Система комплемента: состав, пути активации. Иммунологическое действие.
52. Пути активации комплемента: классический и альтернативный.

53. Врождённый иммунитет: виды, рецепторы, связь с приобретённым иммунитетом.
54. Приобретённый иммунитет: виды, эффекторы. Антитела, адаптивный иммунный ответ.
55. Строение, виды и функции антител.
56. Классификация патологических иммунных реакций по Джеллу и Кумбсу. Механизмы возникновения и осуществления реакций гиперчувствительности 1-3-го типов.
57. Механизмы клеточно-опосредованной гиперчувствительности 4-го типа.
58. Патогенные проявления иммунитета. Индукция и нарушение толерантности. Иммунодефициты. Механизмы аутоиммунных реакций.
59. Воспаление: физиологический смысл, симптомы. Медиаторы воспаления.
60. Воспаление. Механизм миграции лейкоцитов, фагоцитоз.
61. Метаболические особенности нейрона. Патогенез ишемии клеток мозга, вызванной инсультом.
62. Основные стадии процесса передачи нервного импульса. Этиология различных видов эпилепсии.
63. Синапс. Нейромедиаторы. Роль нейромодуляторов в работе синапса.
64. Патологии синаптической передачи.
65. Характеристика нейродегенеративных заболеваний. Болезнь Альцгеймера. Хорея Гентингтона.
66. Характеристика нейродегенеративных заболеваний. Хорея Гентингтона.
67. Характеристика нейродегенеративных заболеваний. Болезнь Паркинсона.

Максимальное количество баллов за зачет с оценкой – 40 баллов.

8.4. Структура и примеры билетов для зачета с оценкой

Зачет с оценкой по дисциплине «Патологическая биохимия» проводится в 1 семестре и включает контрольные вопросы по всем разделам рабочей программы дисциплины. Билет для зачета с оценкой состоит из 4 вопросов, относящихся к указанным разделам.

Пример билета для зачета с оценкой:

«Утверждаю» Зав. каф. ХТБМП _____ М.С. Ощепков «__» _____ 20__ г.	Министерство науки и высшего образования РФ
	Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева
	Кафедра химии и технологии биомедицинских препаратов
	18.04.01 Химическая технология
	Магистерская программа – «Химия и технология биологически активных веществ»
«Патологическая биохимия»	
Билет № 1	
1. Типовые молекулярно-клеточные патологические реакции (общая характеристика). 2. Особенности оксида азота (II) как участника физиологических процессов. Пути синтеза оксида азота (II) в организме. NO-синтазы: классификация, особенности строения, механизм синтеза оксида азота (II). 3. Иммунитет. Система HLA (МНС). Классы HLA, строение, процессирование и презентация антигена. Иммунологическая роль. 4. Характеристика нейродегенеративных заболеваний. Хорея Гентингтона.	

9. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

9.1. Рекомендуемая литература

А. Основная литература

1. Луценко В.К. Молекулярная патофизиология. – М.: МАИК «Наука/Интерпериодика». – 2004. – 270 с. (Базовый учебник).
2. Эллиот, В. Биохимия и молекулярная биология [Текст]: пер. с англ.: Учеб. пособие для студ. мед. и фармацевт. спец. мед. вузов. – М.: МАИК «Наука/Интерпериодика», 2002. – 446 с. (Базовый учебник).
3. Коваленко, Л.В. Биохимические основы химии биологически активных веществ – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2014. – 229 с.
4. Соловьева И.Н., Ткаченко С.В., Коваленко Л.В., Дегтярёв В.П. Основы нейрехимии в норме и при патологии: учебное пособие. – М. Издательство РХТУ им. Д.И. Менделеева. – 2019. – 156 с.

Б. Дополнительная литература

1. Основы биохимии. Статическая биохимия [Текст]: учебное пособие / О. Д. Лопина [и др.]. – М.: РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2013. – 172 с.
2. Луценко В.К. Биохимия клетки: учеб. пособие. – М.: РХТУ им. Д.И. Менделеева. – 2005. – 92 с.
3. Луценко В.К. Биохимия иммунитета и нейрехимия: учеб. пособие. – М.: РХТУ им. Д.И. Менделеева. – 2004. – 92 с.
4. Основы биохимии Ленинджера в 3-х томах. Том 1: Основы биохимии, строение и катализ / Д. Нельсон, М. Коке; пер. с англ. 3-е изд., испр. – М.: БИНОМ: Лаборатория знаний, 2017. – 694 с.
5. Кольман Я., Рём К.-Г. Наглядная биохимия. – М.: БИНОМ: Лаборатория знаний, 2011. – 472с.

9.2. Рекомендуемые источники научно-технической информации

Научные журналы:

- Журнал «Молекулярная биология» ISSN 0026-8984
- Биомедицинская химия ISSN 1990-7508
- Иммунология ISSN 2412-1312
- Патологическая физиология и экспериментальная терапия ISSN 0031-2991
- Journal of Cellular & Molecular Pathology ISSN 0014-4800
- Journal of Molecular Pathophysiology ISSN 2146-832X
- Journal of Glycomics & Lipidomics ISSN 2153-0637
- Journal of Biomolecular Research & Therapeutics ISSN 2167-7956
- Advances in Molecular Diagnostics ISSN 2572-5645
- Журнал «Биоорганическая химия» ISSN 0132-3423
- Журнал «Биохимия» ISSN 0320-9725
- Журнал «Молекулярная биология» ISSN 0026-8984

10. ПЕРЕЧЕНЬ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ В ОБРАЗОВАТЕЛЬНОМ ПРОЦЕССЕ

Информационную поддержку изучения дисциплины осуществляет Информационно-библиотечный центр (ИБЦ) РХТУ им. Д.И. Менделеева, который обеспечивает обучающихся основной учебной, учебно-методической и научной литературой, необходимой для организации образовательного процесса по дисциплине. Общий объем многоотраслевого фонда ИБЦ на 01.01.2024 г. составляет 1 559 436 экз.

Фонд ИБЦ располагает учебной, учебно-методической и научно-технической литературой в форме печатных и электронных изданий, а также включает официальные, справочно-библиографические, специализированные отечественные и зарубежные периодические и информационные издания. ИБЦ обеспечивает доступ к профессиональным базам данных, информационным, справочным и поисковым системам.

Каждый обучающийся обеспечен свободным доступом из любой точки, в которой имеется доступ к сети Интернет и к электронно-библиотечной системе (ЭБС) Университета, которая содержит различные издания по основным изучаемым дисциплинам и сформирована по согласованию с правообладателями учебной и учебно-методической литературы.

Для более полного и оперативного справочно-библиографического и информационного обслуживания в ИБЦ реализована технология Электронной доставки документов.

Полный перечень электронных информационных ресурсов, используемых в процессе обучения, представлен в основной образовательной программе.

11. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

В соответствии с учебным планом занятия по дисциплине «Патологическая биохимия» проводятся в форме лекций, практических занятий и самостоятельной работы обучающегося.

11.1. Оборудование, необходимое в образовательном процессе:

Лекционная учебная аудитория, оборудованная электронными средствами демонстрации (компьютер со средствами звуковоспроизведения, проектор, экран) и учебной мебелью.

11.2. Учебно-наглядные пособия:

Раздаточный иллюстративный материал к практическим занятиям.

11.3. Компьютеры, информационно-телекоммуникационные сети, аппаратно-программные и аудиовизуальные средства:

Персональные компьютеры, укомплектованные принтерами и программными средствами, проекторы, экраны, МФУ, локальная сеть с выходом в Интернет.

11.4. Печатные и электронные образовательные и информационные ресурсы:

Информационно-методические материалы: учебные пособия по дисциплине, раздаточный материал к практическим занятиям.

Электронные образовательные ресурсы: электронные презентации к разделам лекционного курса; учебно-методические разработки в электронном виде.

11.5. Перечень лицензионного программного обеспечения:

№ п/п	Наименование программного продукта	Реквизиты договора поставки	Примечание	Срок окончания действия лицензии
1.	Micosoft Office Standard 2013	Контракт № 62-64ЭА/2013 от 02.12.2013	Лицензия на ПО, принимающее участие в образовательных процессах.	бессрочная
2.	Microsoft Office Professional Plus 2019 В составе: Word, Excel, Power Point, Outlook, OneNote, Access, Publisher, InfoPath	Контракт № 28-35ЭА/2020 от 26.05.2020	Лицензия на ПО, принимающее участие в образовательных процессах.	12 месяцев (ежегодное продление подписки с правом перехода на обновлённую версию продукта)
3.	Kaspersky Endpoint Security для бизнеса – Стандартный Russian Edition.	Контракт № 90-133ЭА/2021 от 07.09.2021	Лицензия на ПО, не принимающее прямого участия в образовательных процессах (инфраструктурное/ вспомогательное ПО)	12 месяцев (ежегодное продление подписки с правом перехода на обновлённую версию продукта)
4.	«Антиплагиат.ВУЗ 5.0»	Контракт от 08.05.2024 №34-523К/2024	Лимит проверок 10 000	19.05.2025

12. ТРЕБОВАНИЯ К ОЦЕНКЕ КАЧЕСТВА ОСВОЕНИЯ ПРОГРАММЫ

Наименование разделов	Основные показатели оценки	Формы и методы контроля и оценки
Раздел 1. Молекулярная патобиохимия клетки.	<i>Знает:</i> – Современные научные достижения и перспективные направления работ в области патологических биохимических реакций; – Современные химические, физико-химические, фотохимические, кинетические и термодинамические, механические представления о патологическом протекании биохимических процессов и возможностях их корректировки; – Основные типы, механизмы и предпосылки развития патобиохимических процессов. <i>Умеет:</i> – Проводить анализ научной литературы в области современных исследований в области патологической биохимии;	Оценка за контрольную работу №1 Оценка за реферат Оценка за зачет

	– Формулировать возможные механизмы поражения организма при нарушении биохимических процессов в клетках разных тканей; – Применять теоретические знания по нормальной и патологической биохимии для выбора возможных биомедицинских для лечения заболеваний или купирования негативного состояния организма, сопутствующего им. <i>Владеет:</i> – Методами работы с научной, справочной литературой и электронно-библиотечными ресурсами по основам патологической биохимии и исследований в этой области; – Методологическими подходами, позволяющими выявлять взаимосвязи между нарушениями биохимических реакций на уровне субклеточных структур и их проявлениями на уровне организма; – Методами критического анализа и оценки современных научных достижений в области патологической биохимии, генерирования новых идей при решении исследовательских и практических задач в данной области; – Способностью и готовностью к разработке новых подходов к воздействию на потенциальные биомедицины для лечения заболеваний или купирования негативного состояния организма.	
Раздел 2. Патология молекулярных систем управления клеточными процессами.	<i>Знает:</i> – Современные научные достижения и перспективные направления работ в области патологических биохимических реакций; – Современные химические, физико-химические, фотохимические, кинетические и термодинамические, механические представления о патологическом протекании биохимических процессов и возможностях их корректировки; – Основные типы, механизмы и предпосылки развития патобиохимических процессов. <i>Умеет:</i>	Оценка за контрольную работу №1 Оценка за реферат Оценка за зачет

	– Проводить анализ научной литературы в области современных исследований в области патологической биохимии; – Формулировать возможные механизмы поражения организма при нарушении биохимических процессов в клетках разных тканей; – Применять теоретические знания по нормальной и патологической биохимии для выбора возможных биомедицинских для лечения заболеваний или купирования негативного состояния организма, сопутствующего им. <i>Владеет:</i> – Методами работы с научной, справочной литературой и электронно-библиотечными ресурсами по основам патологической биохимии и исследований в этой области; – Методологическими подходами, позволяющими выявлять взаимосвязи между нарушениями биохимических реакций на уровне субклеточных структур и их проявлениями на уровне организма; – Методами критического анализа и оценки современных научных достижений в области патологической биохимии, генерирования новых идей при решении исследовательских и практических задач в данной области; – Способностью и готовностью к разработке новых подходов к воздействию на потенциальные биомедицины для лечения заболеваний или купирования негативного состояния организма.	
Раздел 3. Биохимия иммунитета	<i>Знает:</i> – Современные научные достижения и перспективные направления работ в области патологических биохимических реакций; – Современные химические, физико-химические, фотохимические, кинетические и термодинамические, механические представления о патологическом протекании биохимических процессов и возможностях их корректировки;	Оценка за контрольную работу №2 Оценка за реферат Оценка за зачет

	– Основные типы, механизмы и предпосылки развития патобиохимических процессов. <i>Умеет:</i> – Проводить анализ научной литературы в области современных исследований в области патологической биохимии; – Формулировать возможные механизмы поражения организма при нарушении биохимических процессов в клетках разных тканей; – Применять теоретические знания по нормальной и патологической биохимии для выбора возможных биомаркеров для лечения заболеваний или купирования негативного состояния организма, сопутствующего им. <i>Владеет:</i> – Методами работы с научной, справочной литературой и электронно-библиотечными ресурсами по основам патологической биохимии и исследований в этой области; – Методологическими подходами, позволяющими выявлять взаимосвязи между нарушениями биохимических реакций на уровне субклеточных структур и их проявлениями на уровне организма; – Методами критического анализа и оценки современных научных достижений в области патологической биохимии, генерирования новых идей при решении исследовательских и практических задач в данной области; – Способностью и готовностью к разработке новых подходов к воздействию на потенциальные биомаркеры для лечения заболеваний или купирования негативного состояния организма.	
Раздел 4. Патофизиология нейронов. Структурно-функциональная организация нервных клеток.	<i>Знает:</i> – Современные научные достижения и перспективные направления работ в области патологических биохимических реакций; – Современные химические, физико-химические, фотохимические, кинетические и термодинамические,	Оценка за контрольную работу №2 Оценка за реферат Оценка за зачет

	механические представления о патологическом протекании биохимических процессов и возможностях их корректировки; – Основные типы, механизмы и предпосылки развития патобиохимических процессов. <i>Умеет:</i> – Проводить анализ научной литературы в области современных исследований в области патологической биохимии; – Формулировать возможные механизмы поражения организма при нарушении биохимических процессов в клетках разных тканей; – Применять теоретические знания по нормальной и патологической биохимии для выбора возможных биомедицинских для лечения заболеваний или купирования негативного состояния организма, сопутствующего им. <i>Владеет:</i> – Методами работы с научной, справочной литературой и электронно-библиотечными ресурсами по основам патологической биохимии и исследований в этой области; – Методологическими подходами, позволяющими выявлять взаимосвязи между нарушениями биохимических реакций на уровне субклеточных структур и их проявлениями на уровне организма; – Методами критического анализа и оценки современных научных достижений в области патологической биохимии, генерирования новых идей при решении исследовательских и практических задач в данной области; – Способностью и готовностью к разработке новых подходов к воздействию на потенциальные биомедицины для лечения заболеваний или купирования негативного состояния организма.	

13. ОСОБЕННОСТИ ОРГАНИЗАЦИИ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО ПРОЦЕССА ДЛЯ ИНВАЛИДОВ И ЛИЦ С ОГРАНИЧЕННЫМИ ВОЗМОЖНОСТЯМИ ЗДОРОВЬЯ

Обучение инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья осуществляется в соответствии с:

– Порядком организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры (Приказ Министерства науки и высшего образования Российской Федерации от 06.04.2021 № 245);

– Положением о порядке организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева», принятым решением Ученого совета РХТУ им. Д.И. Менделеева от 28.12.2022, протокол № 5;

– Методическими рекомендациями по организации образовательного процесса для обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья в образовательных организациях высшего образования, в том числе оснащенности образовательного процесса (утверждены заместителем Министра образования и науки РФ А.А. Климовым от 08.04.2014 № АК-44/05вн).

Дополнения и изменения к рабочей программе дисциплины

«Паталогическая биохимия»

основной образовательной программы

**по направлению подготовки 18.04.01 Химическая технология,
магистерская программа – «Химия и технология биологически активных веществ»**

Форма обучения: **очная**

Номер изменения/дополнения	Содержание дополнения/изменения	Основание внесения изменения/дополнения
1.		протокол заседания Ученого совета № _____ от «___» _____ 20__ г.
		протокол заседания Ученого совета № _____ от «___» _____ 20__ г.
		протокол заседания Ученого совета № _____ от «___» _____ 20__ г.
		протокол заседания Ученого совета № _____ от «___» _____ 20__ г.
		протокол заседания Ученого совета № _____ от «___» _____ 20__ г.

**Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Российский химико-технологический университет
имени Д.И. Менделеева»**

«УТВЕРЖДЕНО»
на заседании Ученого совета
РХТУ им. Д.И. Менделеева
протокол № 1 от «29» августа 2024 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

**«Современные направления и методы получения
биомедицинских препаратов»**

Направление подготовки 18.04.01 Химическая технология

**Магистерская программа:
«Химия и технология биологически активных веществ»**

Квалификация «магистр»

Москва 2024

Программа составлена на кафедре Химии и технологии биомедицинских препаратов.
Авторы программы: д.х.н., проф. Кочетков К.А., к.х.н., доц. Калистратова А.В.

Программа рассмотрена и одобрена на заседании Кафедры химии и технологии биомедицинских препаратов «16» апреля 2024 г., протокол №7.

1. ЦЕЛЬ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ

Программа составлена в соответствии с требованиями Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования – магистратура по направлению подготовки 18.04.01 Химическая технология (ФГОС ВО), рекомендациями Методической комиссии и накопленным опытом преподавания дисциплины кафедрой Химии и технологии биомедицинских препаратов РХТУ им. Д.И. Менделеева. Программа рассчитана на изучение дисциплины в течение одного семестра.

Дисциплина «Современные направления и методы получения биомедицинских препаратов» относится к дисциплинам по выбору части дисциплин учебного плана, формируемой участниками образовательных отношений. Программа дисциплины предполагает, что обучающиеся имеют теоретическую и практическую подготовку в области органической химии, биохимии, а также в области химии биологически активных веществ.

Цель дисциплины – формирование у обучающихся углубленных знаний в области разработки биомедицинских препаратов, полученных на основе оптически активных соединений.

Задачи дисциплины:

- формирование у студентов фундаментальной материаловедческой базы и системных углубленных знаний в области стереохимии органических соединений
- подготовка высококвалифицированных химиков, способных работать в области оптически активных природных соединений, фармацевтической химии и биохимии.
- выработка системного подхода к постановке научной задачи, ее выполнению и анализу результатов исследований в области оптически активных соединений.

Дисциплина «Современные направления и методы получения биомедицинских препаратов» преподается во 2-м семестре. Контроль успеваемости студентов ведется по принятой в университете рейтинговой системе.

Рабочая программа дисциплины может быть реализована с применением электронных образовательных технологий и электронного обучения полностью или частично.

2. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Изучение дисциплины направлено на приобретение следующих **компетенций и индикаторов их достижения:**

Профессиональные компетенции и индикаторы их достижения:

Задача профессиональной деятельности	Объект или область знания	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК	Основание (профессиональный стандарт, анализ опыта) Обобщенные трудовые функции
Научно-исследовательский тип задач профессиональной деятельности				
Выполнение фундаментальных и прикладных работ поискового, теоретического и экспериментального характера с целью определения технических характеристик новой техники, а также комплекса работ по разработке технологической документации.	Химическое, химико-технологическое производство Сквозные виды профессиональной деятельности в промышленности (в сфере организации и проведения научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ в области химического и химико-технологического производства).	ПК-2. Способен к поиску, обработке, анализу и систематизации научно-технической информации по теме исследования, выбору методик и средств решения задачи	ПК-2.1. Знает алгоритм поиска, оценки и анализа научно-технической информации; ПК-2.2. Умеет обобщать и систематизировать научно-техническую информацию; ПК-2.3. Владеет навыками соотнесения результатов собственной научной работы с отечественным и зарубежным опытом по тематике исследования.	Профессиональный стандарт 40.011 «Специалист по научно-исследовательским и опытно-конструкторским разработкам», утвержденный приказом Министерства труда и социальной защиты Российской Федерации от 04.03.2014 № 121 н, Обобщенная трудовая функция С. Проведение научно-исследовательских и опытно-конструкторских разработок. С /01.6. Осуществление научного руководства проведением исследований по отдельным задачам (уровень квалификации – 6).
		ПК-3. Способен применять современные приборы и методы исследования, планировать, организовывать и проводить эксперименты и испытания, корректно обрабатывать и анализировать полученные результаты	ПК-3.1. Знает экспериментальные методы и их приборное и аппаратное оформление для исследования веществ и материалов;	
		ПК-4. Способен проводить поисковые исследования инновационных технологических процессов в	ПК-4.2. Умеет производить поисковые работы для разработки новых методов получения и анализа	

		области биологически активных веществ	биологически активных веществ.	
		ПК-5 Способен осуществлять самостоятельные научные исследования в области химии и технологии биологически активных веществ	ПК-5.1. Знает методы получения, особенности производства, свойства и механизмы действия биологически активных веществ различных классов; ПК-5.3. Умеет использовать теоретические знания по химии и технологии биологически активных веществ для решения конкретных задач научно-исследовательской деятельности.	

В результате изучения дисциплины студент магистратуры должен:

Знать:

- Современные научные достижения и перспективные направления работ в области биомедицинских препаратов;
- Современные научные достижения и перспективные направления работ в области оптически активных фармацевтических препаратов;
- Основные закономерности влияния пространственного строения органических соединений на их физические и химические свойства, а также на биологическую активность;
- Типы номенклатур и правила составления названий оптически активных соединений, в том числе полициклических структур;
- Основные пути создания новых видов и типов оптически активных фармацевтических препаратов.

Уметь:

- Проводить анализ научно-технической литературы в области современных и перспективных видов биомедицинских препаратов и их технологий;
- Проводить аналитические исследования состава, структуры и стереохимических свойств фармацевтических препаратов;
- Изображать пространственное строение молекул, представлять изомеры с помощью проекционных формул Ньюмена и Фишера, пользоваться этими формулами, определять конфигурацию асимметрического центра;
- Применять теоретические знания по современным и перспективным видам оптически активных фармацевтических препаратов для решения исследовательских и прикладных задач, в том числе в междисциплинарных областях.

Владеть:

- Методами работы с научно-технической, справочной литературой и электронно-библиотечными ресурсами в области биомедицинских препаратов и их технологий;
- Методологическими подходами к получению оптически чистых физиологических веществ.
- Основными методами определения и анализа оптически активных веществ;
- Методами критического анализа и оценки современных научных достижений, генерирования новых идей при решении исследовательских и практических задач в области оптически активных фармацевтических препаратов;
- Способностью и готовностью к разработке новых методов исследования и их применению в самостоятельной научно-исследовательской деятельности в области оптически активных веществ.

3. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Вид учебной работы	Всего		Семестр			
			1 семестр		2 семестр	
	ЗЕ	Акад. ч.	ЗЕ	Акад. ч.	ЗЕ	Акад. ч.
Общая трудоемкость дисциплины	6	216	2	72	4	144
Контактная работа – аудиторные занятия:	1,89	68	0,95	34	0,95	34
Лекции	0,945	34	0,47	17	0,47	17
Практические занятия	0,945	34	0,47	17	0,47	17
в том числе в форме практической подготовки	0,945	34	0,47	17	0,47	17
Самостоятельная работа	3,11	112	1,05	38	2,05	74

Контактная самостоятельная работа	3,11	0,2	1,05	0,2	2,05	-
Самостоятельное изучение разделов дисциплины		111,8		37,8		74
Виды контроля:						
Экзамен	1	36	-	-	1	36
Контактная работа – промежуточная аттестация	1	0,4	-	-	1	0,4
Подготовка к экзамену		35,6		-		35,6
Вид итогового контроля:			Зачет		Экзамен	

Вид учебной работы	Всего		Семестр			
			1 семестр		2 семестр	
	ЗЕ	Астр. ч.	ЗЕ	Астр. ч.	ЗЕ	Астр. ч.
Общая трудоемкость дисциплины	6	162	2	54	4	108
Контактная работа – аудиторные занятия:	1,89	51	0,95	25,5	0,95	25,5
Лекции	0,945	25,5	0,47	12,75	0,47	12,75
Практические занятия	0,945	25,5	0,47	12,75	0,47	12,75
в том числе в форме практической подготовки	0,945	25,5	0,47	12,75	0,47	12,75
Самостоятельная работа	3,11	84	1,05	28,5	2,05	55,5
Контактная самостоятельная работа	3,11	0,15	1,05	0,15	2,05	-
Самостоятельное изучение разделов дисциплины		83,85		28,35		55,5
Виды контроля:						
Экзамен	1	27	-	-	1	27
Контактная работа – промежуточная аттестация	1	0,3	-	-	1	0,3
Подготовка к экзамену.		26,7		-		26,7
Вид итогового контроля:			Зачет		Экзамен	

4. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

4.1. Разделы дисциплины и виды занятий

№ п/п	Раздел дисциплины	Академ. часов					
		Всего	в т.ч. в форме пр. подг.	Лекции	Прак. зан.	в т.ч. в форме пр. подг.	Сам. работа
1	Современные научные достижения в области биомедицинских препаратов. Предмет стереохимии и ее значение в области биомедицинской химии. Основные разделы стереохимии.	38	8	8	8	8	22
2	Способы изображения пространственного строения молекул и номенклатура стереоизомеров.	38	8	8	8	8	22
3	Основные методы определения и анализа оптически активных веществ.	36	6	6	6	6	24
4	Типы хирального воздействия и основные методы получения оптически активных веществ.	36	6	6	6	6	24
5	Связь стереохимического строения с биологической активностью.	32	6	6	6	6	20
	ИТОГО	180	34	34	34	34	112
	Экзамен	36	-	-	-	-	-
	ИТОГО	216	-	-	-	-	-

4.2 Содержание разделов дисциплины

Раздел 1. Современные научные достижения в области биомедицинских препаратов. Предмет стереохимии и ее значение в области биомедицинской химии. Основные разделы стереохимии.

Предмет и история развития стереохимии. Современные научные достижения в области биомедицинских препаратов, роль стереохимии в биомедицинских исследованиях. Основные разделы стереохимии, структурная стереохимия. Важность стереохимии для фармакологии и химико-фармацевтических производств.

Основные положения и понятия стереохимии. Строение молекулы, конфигурация, центр диссимметрии, асимметрический атом углерода, хиральный центр, конформация, конформационный анализ, структура молекулы. Изомерия и ее три вида: структурная, конфигурационная и конформационная изомерия. Стереои́зомерия, понятие о энантиомерах и диастереомерах. Рацематы. Понятие о хиральности молекул и предметов. Современная теория симметрии кристаллических твердых тел. Международная символика обозначения пространственных групп симметрии (символика Шенфлиса). Элементы симметрии: ось симметрии n -го порядка, зеркально-поворотные оси, центры симметрии и плоскости симметрии. Ахиральные и хиральные молекулы, число стереомеров. Понятие об оптическом вращении и его знаке.

Раздел 2. Способы изображения пространственного строения молекул и номенклатура стереоизомеров.

Пространственные модели, полусферические модели Стюарта-Вриглеба, шаростержневые модели. Перспективные формулы, клиновидная проекция, проекционные формулы Ньюмена и Фишера. Правила пользования проекциями Фишера. Энантиомерные и диастереомерные соотношения.

Система Кана - Ингольда - Прелога и основные этапы процедуры наименования абсолютной конфигурации молекул: определение старшинства заместителей, расположение заместителей, расположение молекулы вдоль связи с младшим заместителем и определения направления падения старшинства заместителей. Примеры. D,L-Номенклатура, D-глицериновый альдегид, связь двух основных видов номенклатуры.

Различия и сходства в химических и физических свойствах энантиомеров и диастереомеров. Мезо-формы. Удельное оптическое вращение. Дисперсия оптического вращения. Оптическая чистота, энантиомерный избыток. Рацемизация, эпимеризация.

E, Z- номенклатура олефинов. Асимметрический атомом углерода как хиральный центр. Примеры центральной, аксиальной симметрии. Атропоизомерия. Хиральная ось, плоскость, спиральность. Ахиральность. Прохиральность. Примеры соединений с неуглеродным хиральным центром.

Раздел 3. Основные методы определения и анализа оптически активных веществ.

Основные методы определения энантиомерного и диастереомерного состава оптически активных веществ.

Относительные методы определения конфигурации. а). Химическая корреляция б). Установление относительной конфигурации с помощью физических методов.

Метод химической корреляции. Метод изотопного разбавления (радиоактивные и стабильные изотопы). Измерение оптического вращения. Изучение спектров ДОВ. Биохимические методы разложения и кинетического расщепления. Калориметрический метод. Метод ГЖХ а) диастереомерные производные. б) использование хиральных носителей. Метод ВЭЖХ на хиральных колонках. Метод ЯМР а) диастереомерных производных. б) использование хиральных растворителей в) использование лантаноидных сдвигающих реагентов.

Определение абсолютной конфигурации веществ

а) Дифракция рентгеновских лучей. б). Теоретический расчет оптического вращения

Раздел 4. Типы хирального воздействия и основные методы получения оптически активных веществ.

Типы хирального воздействия. Исходное соединение оптически активно. Воздействие хирального реагента. Воздействие хиральной уходящей группы. Воздействие хиральной среды (растворитель, свет и т.д.). Воздействие хиральной подложки.

Методы расщепления рацематов, разделение и выделение диастереомеров. Стереонаправленный синтез из других оптически активных соединений, метод химической корреляции. Асимметрический синтез с использованием хиральных регенерируемых реагентов. Каталитический асимметрический синтез. Химико-ферментативный синтез. Энзиматические методы. Сочетание нескольких методов и подходов.

Новые химические технологии получения оптически чистых биологически активных соединений.

Раздел 5. Связь стереохимического строения с биологической активностью.

Хиральность в природе. Примеры различной биологической активности S- и R-соединений. Активность рацематов, талидомид. Причины различия в поведении энантиомерных молекул по отношению к симметричным реагентам и к хиральным молекулам.

Модель трехточечного продуктивного связывания с активным центром фермента. Оптически активные аминокислоты и хиральные биологически активные производные кислот фосфора - компоненты высокоэффективных медицинских препаратов. Изменение биологической активности соединений в зависимости от их стереохимии. Важность стереохимии для фармакологии и химико-фармацевтических производств.

5. СООТВЕТСТВИЕ СОДЕРЖАНИЯ ТРЕБОВАНИЙ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

№	В результате освоения дисциплины студент должен:	Раздел 1	Раздел 2	Раздел 3	Раздел 4	Раздел 5
	Знать:					
	– Современные научные достижения и перспективные направления работ в области биомедицинских препаратов;	+		+	+	+
	– Современные научные достижения и перспективные направления работ в области оптически активных фармацевтических препаратов	+		+	+	+
	– Основные закономерности влияния пространственного строения органических соединений на их физические и химические свойства, а также на биологическую активность	+	+	+	+	+
	– Типы номенклатур и правила составления названий оптически активных соединений, в том числе полициклических структур	+	+			
	– Основные пути создания новых видов и типов оптически активных фармацевтических препаратов	+		+	+	+
	Уметь:					
	– Проводить анализ научно-технической литературы в области современных и перспективных видов биомедицинских препаратов и их технологий;	+		+	+	+
	– Проводить аналитические исследования состава, структуры и стереохимических свойств фармацевтических препаратов;	+				+
	– Изображать пространственное строение молекул, представлять изомеры с помощью проекционных формул Ньюмена и Фишера, пользоваться этими формулами, определять конфигурацию асимметрического центра;		+			
	– Применять теоретические знания по современным и перспективным видам оптически активных фармацевтических препаратов для решения исследовательских и прикладных задач, в том числе в междисциплинарных областях.			+	+	+
	Владеть:					
	– Методами работы с научно-технической, справочной литературой и электронно-библиотечными ресурсами в области биомедицинских препаратов и их технологий	+		+	+	+
	– Методологическими подходами к получению оптически чистых физиологических веществ			+	+	+
	– Основными методами определения и анализа оптически активных веществ			+		

	– Методами критического анализа и оценки современных научных достижений, генерирования новых идей при решении исследовательских и практических задач в области оптически активных фармацевтических препаратов		+		+	+	+
	– Способностью и готовностью к разработке новых методов исследования и их применению в самостоятельной научно-исследовательской деятельности в области оптически активных веществ		+		+	+	+
	В результате освоения дисциплины студент должен приобрести следующие <i>профессиональные компетенции и индикаторы их достижения:</i>						
	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК					
7	ПК-2. Способен к поиску, обработке, анализу и систематизации научно-технической информации по теме исследования, выбору методик и средств решения задачи	ПК-2.1. Знает алгоритм поиска, оценки и анализа научно-технической информации;	+		+	+	+
		ПК-2.2. Умеет обобщать и систематизировать научно-техническую информацию;	+		+	+	+
		ПК-2.3. Владеет навыками соотнесения результатов собственной научной работы с отечественным и зарубежным опытом по тематике исследования.	+		+	+	+
	ПК-3. Способен применять современные приборы и методы исследования, планировать, организовывать и проводить эксперименты и испытания, корректно обрабатывать и анализировать полученные результаты	ПК-3.1. Знает экспериментальные методы и их приборное и аппаратное оформление для исследования веществ и материалов;			+		+
	ПК-4 Способен проводить поисковые исследования инновационных технологических процессов в области биологически активных веществ	ПК-4.2 Умеет производить поисковые работы для разработки новых методов получения и анализа биологически активных веществ.	+		+	+	+
8	ПК-5 Способен осуществлять самостоятельные научные исследования в области химии и технологии биологически активных веществ	ПК-5.1. Знает методы получения, особенности производства, свойства и механизмы действия биологически активных веществ различных классов;	+		+	+	+

		ПК-5.3. Умеет использовать теоретические знания по химии и технологии биологически активных веществ для решения конкретных задач научно-исследовательской деятельности.	+		+	+	+

6. ПРАКТИЧЕСКИЕ И ЛАБОРАТОРНЫЕ ЗАНЯТИЯ

6.1. Практические занятия

Примерные темы практических занятий по дисциплине.

№ п/п	№ раздела дисциплины	Темы практических занятий	Часы
1	1	Международная символика обозначений пространственных групп симметрии кристаллов, понятий конфигурация, центр диссимметрии, асимметрический атом углерода, хиральный центр, конформация	2
2		Изучение видов изомерии: структурная, конфигурационная и конформационная изомерия	2
3		Выявление связи элементов симметрии: ось симметрии n-го порядка, зеркально-поворотные оси, центры симметрии и плоскости симметрии с понятием о энантиомерах и диастереомерах, ахиральных и хиральных молекул. Понятие об оптическом вращении и его знаке	4
4	2	Применение перспективных формул, клиновидных проекций, проекционных формул Ньюмена и Фишера. Правила пользования проекциями Фишера	3
5		Освоение системы Кана - Ингольда - Прелога и процедуры наименования абсолютной конфигурации молекул: определение старшинства заместителей, расположение заместителей, расположение молекулы вдоль связи с младшим заместителем и определения направления падения старшинства заместителей	3
6		Усвоение различий и сходства в химических и физических свойствах энантиомеров и диастереомеров. Определение удельного оптического вращения, оптической чистоты, энантиомерного избытка. E, Z- номенклатура олефинов	2
7	3	Определение понятий центральной, аксиальной симметрии. Атропоизомерия. Хиральная ось, плоскость, спиральность. Ахиральность. Прохиральность. Примеры соединений с неуглеродным хиральным центром	2
8		Усвоение основных методов определения энантиомерного и диастереомерного состава оптически активных веществ. Метод химической корреляции. Метод изотопного разбавления (радиоактивные и стабильные изотопы). Измерение оптического вращения. Изучение спектров ДОВ. Биохимические методы разложения и кинетического расщепления. Калориметрический метод. Метод ГЖХ а) диастереомерные производные. б) использование хиральных	2

		носителей. Метод ВЭЖХ на хиральных колонках. Метод ЯМР а) диастереомерных производных. б) использование хиральных растворителей в) использование лантаноидных сдвигающих реагентов	
9		Определение абсолютной конфигурации веществ а). Дифракция рентгеновских лучей. б). Теоретический расчет оптического вращения	2
10	4	Выявление типов хирального воздействия	2
11		Усвоение методов расщепления рацематов, разделение и выделение диастереомеров	2
12		Рассмотрение примеров стереонаправленного синтеза из других оптически активных соединений, метода химической корреляции, асимметрического синтеза с использованием хиральных регенерируемых реагентов, химико-ферментативного синтеза	2
13	5	Усвоение новых химических технологий получения оптически чистых биологически активных соединений	2
14		Рассмотрение примеров различной биологической активности S- и R-соединений и каталитического асимметрического синтеза	2
15		Причины изменения биологической активности соединений в зависимости от их стереохимии. Важность стереохимии для фармакологии и химико-фармацевтических производств. Энзиматические методы. Технологическое сочетание нескольких методов и подходов	2

7. САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА

Самостоятельная работа проводится с целью углубления знаний по дисциплине и предусматривает:

- ознакомление и проработку рекомендованной литературы, работу с электронно-библиотечными системами, включая переводы публикаций из научных журналов, цитируемых в базах Scopus, Web of Science, Chemical Abstracts, РИНЦ;
- регулярную проработку пройденного на лекциях и практических занятиях учебного материала и подготовку к выполнению контрольных работ по разделам дисциплины;
- ознакомление и проработку рекомендованной литературы, и работу с электронно-библиотечными системами, включая переводы публикаций из научных журналов, цитируемых в базах Scopus, Web of Science, Chemical Abstracts, РИНЦ;
- подготовку реферативно-аналитической работы по тематике курса на основе проработки рекомендованной литературы и работы с электронно-библиотечными системами;
- посещение отраслевых выставок, семинаров, конференций различного уровня;
- участие в семинарах РХТУ им. И. Менделеева по тематике дисциплины;
- подготовку к сдаче экзамена по дисциплине.

Планирование времени на самостоятельную работу, необходимого на изучение дисциплины, студентам лучше всего осуществлять на весь период изучения, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала. Материал, законспектированный на лекциях, необходимо регулярно дополнять сведениями из литературных источников, представленных в рабочей программе. При работе с указанными источниками рекомендуется составлять краткий конспект материала, с обязательным фиксированием библиографических данных источника.

8. ПРИМЕРЫ ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ КОНТРОЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Совокупная оценка по дисциплине складывается из оценок за выполнение контрольных работ 1 и 2 (2 семестр, максимальная оценка 50 баллов), контрольных работ 3,4,5 (3 семестр, максимальная оценка 30 баллов), реферата №1 (2 семестр, максимальная оценка 50 баллов) и №2 (3 семестр, максимальная оценка 30 баллов) и итогового контроля в форме экзамена (3 семестр, максимальная оценка 40 баллов).

8.1. Примерная тематика реферативно-аналитической работы.

Примерный перечень тем рефератов:

1. Аналитические методы определения оптически активных веществ, их сравнение.
2. Относительная и абсолютная конфигурация веществ
3. Асимметрический синтез капотена
4. Асимметрический синтез нафтилаланина
5. Асимметрический синтез природных соединений
6. Химико-ферментативный синтез аминокислот
7. Ферментативные методы получения аминоспиртов
8. Происхождение хиральности в природе
9. Совершенствование номенклатуры органических соединений
10. Недостатки используемых номенклатур
11. Стереохимия органических структур с хиральным атомом фосфора.
12. Стереохимия органических структур с хиральным атомом кремния
13. Стереохимия органических структур с хиральным атомом палладия

8.2. Примеры контрольных вопросов для текущего контроля освоения дисциплины

Для текущего контроля предусмотрено 5 контрольных работ (по одной контрольной работе для каждого раздела).

Раздел 1. Примеры вопросов к контрольной работе № 1. Максимальная оценка – 30 баллов. Контрольная работа содержит 2 вопроса, по 15 баллов за вопрос.

1. Принципы формирования обозначения пространственных групп по международной символике.
2. Принципы формирования обозначения пространственных групп по символике Шенфлиса.
3. Перечислите виды химических связей. Приведите примеры.
4. Способы расчета удельного вращения молекул.
5. Охарактеризуйте основные разделы стереохимии, структурной стереохимии.
6. Приведите основные критерии наличия асимметрического атома углерода.
7. Обоснуйте понятие хирального центра и асимметрического атома углерода.
8. Охарактеризуйте три вида изомерии: структурной, конфигурационной и

- конформационной изомерии. Приведите примеры.
9. Современные представления о хиральности молекул и предметов. Приведите примеры.
 10. Опишите понятие о энантиомерах и диастереомерах, рацематах. Приведите примеры.
 11. Особенности элементов симметрии: ось симметрии n -го порядка, зеркально-поворотные оси, центры симметрии и плоскости симметрии. Ахиральные и хиральные молекулы, число стереомеров. Привести конкретные примеры.
 12. Понятие об оптическом вращении и его знаке. Привести расчет конкретных примеров.

Раздел 2. Примеры вопросов к контрольной работе № 2. Максимальная оценка – 20 баллов. Контрольная работа содержит 2 вопроса, по 10 баллов за вопрос.

1. Особенности применения пространственных моделей, полусферических моделей Стюарта-Вриглеба, шаростержневых моделей.
2. Особенности построения перспективных формул, клиновидных проекций, проекционных формул Ньюмена и Фишера.
3. Правила пользования проекциями Фишера.
4. Энантиомерные и диастереомерные соотношения. Примеры.
5. Система Кана - Ингольда - Прелога и основные этапы процедуры наименования абсолютной конфигурации молекул. Привести примеры.
6. Определение старшинства заместителей, расположения заместителей, расположения молекулы вдоль связи с младшим заместителем и определения направления падения старшинства заместителей. Примеры определения конфигурации.
7. Переход от системы Кана - Ингольда - Прелога к проекциям Фишера и обратно. Примеры.
8. D,L-Номенклатура, D- глицериновый альдегид, связь двух основных видов номенклатуры.
9. Различия и сходства в химических и физических свойствах энантиомеров и диастереомеров. Решение задач.
10. Мезо-формы. Решение задач на примере сахаров.
11. Дисперсия оптического вращения. Оптическая чистота, энантиомерный избыток. Взаимные соотношения.
12. Обсуждение примеров по рацемизации и эпимеризации.

Раздел 3. Примеры вопросов к контрольной работе № 3. Максимальная оценка – 10 баллов. Контрольная работа содержит 2 вопроса, по 5 баллов за вопрос.

1. Основные методы определения энантиомерного и диастереомерного состава оптически активных веществ. Относительные и абсолютные методы определения конфигурации.
2. Относительные методы определения конфигурации: химическая корреляция, установление относительной конфигурации с помощью физических методов. Примеры.
3. Определение абсолютной конфигурации веществ: дифракция рентгеновских лучей; теоретический расчет оптического вращения. Примеры.
4. Метод химической корреляции. Привести примеры.
5. Метод изотопного разбавления (радиоактивные и стабильные изотопы).
6. Измерение оптического вращения веществ.
7. Изучение спектров ДОВ.
8. Биохимические методы разложения и кинетического расщепления.
9. Калориметрический метод.

10. Метод ГЖХ: диастереомерные производные; использование хиральных носителей.
11. Метод ВЭЖХ на хиральных колонках.
12. Метод ЯМР: диастереомерных производных; использование хиральных растворителей; использование лантаноидных сдвигающих реагентов.

Раздел 4. Примеры вопросов к контрольной работе № 4. Максимальная оценка – 10 баллов. Контрольная работа содержит 2 вопроса по 10 баллов за вопрос.

1. Опишите типы хирального воздействия.
2. Охарактеризуйте воздействие хирального реагента. Приведите примеры, дайте пояснения.
3. Охарактеризуйте воздействие хирального реагента. Приведите примеры, дайте пояснения.
4. Охарактеризуйте воздействие хиральной уходящей группы. Приведите примеры, дайте пояснения.
5. Охарактеризуйте воздействие хиральной среды (растворитель, свет и т.д.). Приведите примеры, дайте пояснения.
6. Охарактеризуйте воздействие хиральной подложки. Приведите примеры, дайте пояснения.
7. Известные методы расщепления рацематов, разделение и выделение диастереомеров.
8. Стереонаправленный синтез из других оптически активных соединений, метод химической корреляции.
9. Асимметрический синтез с использованием хиральных регенерируемых реагентов. Использование. Примеры.
10. Примеры каталитического асимметрического синтеза.
11. Химико-ферментативный синтез в стереохимии.
12. Примеры и важность энзиматических методов в стереохимии.

Раздел 5. Примеры вопросов к контрольной работе № 5. Максимальная оценка – 10 баллов. Контрольная работа содержит 2 вопроса по 10 баллов за вопрос.

1. Мероприятия по предотвращению загрязнения внутренней среды человека нежелательными стереомерами ФАВ.
2. Наилучшие доступные технологии получения оптически чистых веществ (ОЧВ), основные принципы.
3. Справочные документы по ОЧВ. Возможности использования справочных документов по ОЧВ в российской системе технического регулирования.
4. Комплексные экологические и фармацевтические разрешения.
5. Хиральность в природе. Примеры различной биологической активности S- и R-соединений.
6. Физиологическая активность рацематов, талидомид.
7. Причины различия в поведении энантиомерных молекул по отношению к симметричным реагентам и к хиральным молекулам.
8. Модель трехточечного продуктивного связывания с активным центром фермента.
9. Примеры оптически активных аминокислот и хиральных биологически активных производных кислот фосфора.
10. Объяснить причины изменения биологической активности соединений в зависимости от их стереохимии.
11. Пояснить важность стереохимии для фармакологии и химико-фармацевтических производств.

8.3. Вопросы для итогового контроля освоения дисциплины (3 семестр – экзамен)

Билет для экзамена включает контрольные вопросы по всем разделам рабочей программы дисциплины и содержит 4 вопроса по 10 баллов.

1. Модель трехточечного продуктивного связывания с активным центром фермента.
2. Примеры и важность энзиматических методов получения ФАВ.
3. Обоснуйте понятие хирального центра и асимметрического атома углерода.
4. Охарактеризуйте три вида изомерии: структурной, конфигурационной и конформационной изомерии. Приведите примеры.
5. Современные представления о хиральности молекул и предметов. Приведите примеры.
6. Охарактеризуйте три вида изомерии: структурной, конфигурационной и конформационной изомерии. Приведите примеры.
7. Современные представления о хиральности молекул и предметов. Приведите примеры.
8. Хиральность в природе. Примеры различной биологической активности *S*- и *R*-соединений.
9. Система Кана-Ингольда-Прелога и процедура наименования абсолютной конфигурации молекул.
10. Применение перспективных формул, клиновидных проекций, проекционных формул Ньюмена и Фишера.
11. Правила пользования проекциями Фишера.
12. Переход от системы Кана -Ингольда-Прелога к проекциям Фишера
13. Определение старшинства заместителей в системе Кана-Ингольда-Прелога.
14. Переход от системы Кана-Ингольда-Прелога к проекциям Фишера и обратно. Примеры.
15. D,L-Номенклатура, D-глицериновый альдегид, связь двух основных видов номенклатуры.
16. Различия и сходства в химических и физических свойствах энантиомеров и диастереомеров. Определение удельного оптического вращения, оптической чистоты, энантиомерного избытка.
17. Опишите типы хирального воздействия.
18. Особенности элементов симметрии: ось симметрии *n*-го порядка, зеркально-поворотные оси, центры симметрии и плоскости симметрии. Ахиральные и хиральные молекулы, число стереомеров.
19. Определение абсолютной конфигурации веществ
20. Относительные методы определения конфигурации. Метод химической корреляции.
21. Относительные методы определения конфигурации.
22. Относительные методы определения конфигурации. Измерение оптического вращения веществ.
23. Относительные методы определения конфигурации. Изучение спектров ДОВ.
24. Относительные методы определения конфигурации. Биохимические методы разложения и кинетического расщепления.
25. Относительные методы определения конфигурации. Метод ГЖХ: диастереомерные производные, использование хиральных носителей.
26. Относительные методы определения конфигурации. Метод ВЭЖХ на хиральных колонках.
27. Относительные методы определения конфигурации. Метод ЯМР: диастереомерных производных, использование хиральных растворителей, использование лантаноидных сдвигающих реагентов.
28. Классификация и общая характеристика способов получения оптически активных

веществ.

29. Стереохимические особенности строения и связанных с ними физико-химических свойств ФАВ.
30. Основные источники и факторы загрязнения внутренней среды человека при применении ФАВ.
31. Национальные стандарты и справочные документы по ФАВ, их использование для обеспечения безопасности производства.
32. Особенности технологии хиральных ФАВ
33. Примеры оптически активных аминокислот и хиральных биологически активных производных кислот фосфора
34. Известные методы расщепления рацематов, разделение и выделение диастереомеров.
35. Примеры стереонаправленного синтеза из других оптически активных соединений, метод химической корреляции.
36. Примеры асимметрического синтеза с использованием хиральных регенерируемых реагентов.
37. Примеры каталитического асимметрического синтеза.
38. Область химико-ферментативного синтеза. Примеры.
39. Примеры и важность энзиматических методов.
40. Важность стереохимии для фармакологии и химико-фармацевтических производств.

Фонд оценочных средств приведен в виде отдельного документа, являющегося неотъемлемой частью основной образовательной программы.

8.4. Структура и примеры билетов для зачета с оценкой

Экзамен по дисциплине «Современные направления и методы получения биомедицинских препаратов» проводится в 3-м семестре и включает контрольные вопросы по всем разделам рабочей программы дисциплины. Билет для экзамена состоит из 4-х вопросов, относящихся ко всем разделам дисциплины.

Пример билета для экзамена:

<i>«Утверждаю» Зав. каф. ХТБМП</i> _____М.С. Ощепков «__» _____ 20__г.	Министерство науки и высшего образования РФ
	Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева
	Кафедра химии и технологии биомедицинских препаратов
	18.04.01 Химическая технология Магистерская программа – «Химия и технология биологически активных веществ»
	«Современные направления и методы получения биомедицинских препаратов»
Билет № 1 1. Обоснуйте понятие хирального центра и асимметрического атома углерода. 2. Относительные методы определения конфигурации. Биохимические методы разложения и кинетического расщепления. 3. Примеры каталитического асимметрического синтеза. 4. Важность стереохимии для фармакологии и химико-фармацевтических производств.	

9. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

9.1. Рекомендуемая литература

А. Основная литература

1. Травень В. Ф. Органическая химия: учебник для вузов; в 3 т. / В. Ф. Травень. - М.: БИНОМ Лаборатория знаний, 2004. (Базовый учебник).
2. Кочетков К.А., Калистратова А.В. Региоселективный синтез биологически активных веществ. М.: РХТУ – 2017. – 123 с.

Б. Дополнительная литература

1. Илиел Э., Вайлен С., Дойл М. Основы органической стереохимии. М.: БИНОМ. 2007. - 703 с.
2. Коваленко Л.В. Биохимические основы химии биологически активных веществ. М.: БИНОМ, 2010. - 229 с.
3. Граник В.Г. Основы медицинской химии. М.: Вузовская книга. 2006. - 384 с. (Базовый учебник)
4. Беликов В.Г. Фармацевтическая химия. М.: МЕДпресс-информ. 2008. - 616 с.
5. Коваленко Л.В., Ощепков М.С., Соловьева И.Н., «Химия и биологическая активность фосфорорганических соединений», М., РХТУ им. Д.И.Менделеева, 2015. – 156 с.

9.2. Рекомендуемые источники научно-технической информации

- Раздаточный иллюстративный материал к лекциям.
- Презентации к лекциям.

Научно-технические журналы:

- «Журнал Органической химии», ISSN: 0514-7492
- «Журнал Общей химии», ISSN: 0044-460X
- «Известия РАН, серия химическая», ISSN: 0002-3353
- «Успехи химии», ISSN: 0042-1308
- «Кристаллография», ISSN: 0023-4761
- «Химическая промышленность сегодня», ISSN: 0023-110X
- «Tetrahedron», ISSN: 0040-4020
- «Tetrahedron Letters», ISSN: 0040-4039
- «Tetrahedron: Asymmetry», ISSN: 0957-4166
- «Journal of Crystal Growth», ISSN: 0022-0248
- «Mendeleev Communication», ISSN: 0959-9436
- «Chirality», ISSN: 0899-0042
- «Stereochemistry», ISSN: 1024-2430
- «Journal of Organic Chemistry», ISSN: 0022-3263
- «Journal of the American Chemistry Society», ISSN: 0002-7863
- «European Journal of Organic Chemistry», ISSN: 1099-069

10. ПЕРЕЧЕНЬ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ В ОБРАЗОВАТЕЛЬНОМ ПРОЦЕССЕ

Информационную поддержку изучения дисциплины осуществляет Информационно-библиотечный центр (ИБЦ) РХТУ им. Д.И. Менделеева, который

обеспечивает обучающихся основной учебной, учебно-методической и научной литературой, необходимой для организации образовательного процесса по дисциплине. Общий объем многоотраслевого фонда ИБЦ на 01.01.2024 г. составляет 1 559 436 экз.

Фонд ИБЦ располагает учебной, учебно-методической и научно-технической литературой в форме печатных и электронных изданий, а также включает официальные, справочно-библиографические, специализированные отечественные и зарубежные периодические и информационные издания. ИБЦ обеспечивает доступ к профессиональным базам данных, информационным, справочным и поисковым системам.

Каждый обучающийся обеспечен свободным доступом из любой точки, в которой имеется доступ к сети Интернет и к электронно-библиотечной системе (ЭБС) Университета, которая содержит различные издания по основным изучаемым дисциплинам и сформирована по согласованию с правообладателями учебной и учебно-методической литературы.

Для более полного и оперативного справочно-библиографического и информационного обслуживания в ИБЦ реализована технология Электронной доставки документов.

Полный перечень электронных информационных ресурсов, используемых в процессе обучения, представлен в основной образовательной программе.

11. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

В соответствии с учебным планом занятия по дисциплине «Современные направления и методы получения биомедицинских препаратов» проводятся в форме лекций, практических занятий и самостоятельной работы обучающегося.

11.1. Оборудование, необходимое в образовательном процессе:

Лекционная учебная аудитория, оборудованная электронными средствами демонстрации (компьютер со средствами звуковоспроизведения, проектор, экран) и учебной мебелью.

11.2. Учебно-наглядные пособия:

Иллюстрации к разделам лекционного курса и практическим занятиям; графики и таблицы, иллюстрирующие лекционный материал.

11.3. Компьютеры, информационно-телекоммуникационные сети, аппаратно-программные и аудиовизуальные средства:

Персональные компьютеры в аудитории для самостоятельной подготовки обучающихся, укомплектованные принтерами и программными средствами; проекторы и экраны; цифровые камеры; копировальные аппараты; локальная сеть с выходом в Интернет.

11.4. Печатные и электронные образовательные и информационные ресурсы:

Электронные образовательные ресурсы: электронные презентации к разделам лекционного курса; учебно-методические разработки в электронном виде.

11.5. Перечень лицензионного программного обеспечения:

№ п/п	Наименование программного продукта	Реквизиты договора поставки	Примечание	Срок окончания действия лицензии
1.	Micosoft Office Standard 2013	Контракт № 62-64ЭА/2013	Лицензия на ПО, принимающее участие в образовательных процессах.	бессрочная

		от 02.12.2013		
2.	Microsoft Office Professional Plus 2019 В составе: Word, Excel, Power Point, Outlook, OneNote, Access, Publisher, InfoPath	Контракт № 28-35ЭА/2020 от 26.05.2020	Лицензия на ПО, принимающее участие в образовательных процессах.	12 месяцев (ежегодное продление подписки с правом перехода на обновлённую версию продукта)
3.	Kaspersky Endpoint Security для бизнеса – Стандартный Russian Edition.	Контракт № 90-133ЭА/2021 от 07.09.2021	Лицензия на ПО, не принимающее прямого участия в образовательных процессах (инфраструктурное/ вспомогательное ПО)	12 месяцев (ежегодное продление подписки с правом перехода на обновлённую версию продукта)
4.	«Антиплагиат.ВУЗ 5.0»	Контракт от 08.05.2024 №34-523К/2024	Лимит проверок 10 000	19.05.2025

12. ТРЕБОВАНИЯ К ОЦЕНКЕ КАЧЕСТВА ОСВОЕНИЯ ПРОГРАММЫ

Наименование разделов	Основные показатели оценки	Формы и методы контроля и оценки
Раздел 1. Современные научные достижения в области биомедицинских препаратов. Предмет стереохимии и ее значение в области биомедицинской химии. Основные разделы стереохимии.	<i>Знает:</i> – Современные научные достижения и перспективные направления работ в области биомедицинских препаратов; – Современные научные достижения и перспективные направления работ в области оптически активных фармацевтических препаратов; – Основные закономерности влияния пространственного строения органических соединений на их физические и химические свойства, а также на биологическую активность; – Типы номенклатур и правила составления названий оптически активных соединений, в том числе полициклических структур; – Основные пути создания новых видов и типов оптически активных фармацевтических препаратов. <i>Умеет:</i> – Проводить анализ научно-технической литературы в области современных и перспективных видов биомедицинских препаратов и их технологий; – Проводить аналитические исследования состава, структуры и стереохимических свойств	Оценка за контрольную работу №1 Оценка за реферат №1 Оценка за экзамен

	фармацевтических препаратов; <i>Владеет:</i> – Методами работы с научно-технической, справочной литературой и электронно-библиотечными ресурсами в области биомедицинских препаратов и их технологий; – Методами критического анализа и оценки современных научных достижений, генерирования новых идей при решении исследовательских и практических задач в области оптически активных фармацевтических препаратов; – Способностью и готовностью к разработке новых методов исследования и их применению в самостоятельной научно-исследовательской деятельности в области оптически активных веществ.	
Раздел 2. Способы изображения пространственного строения молекул и номенклатура стереоизомеров.	<i>Знает:</i> – Основные закономерности влияния пространственного строения органических соединений на их физические и химические свойства, а также на биологическую активность; – Типы номенклатур и правила составления названий оптически активных соединений, в том числе полициклических структур; <i>Умеет:</i> – Изображать пространственное строение молекул, представлять изомеры с помощью проекционных формул Ньюмена и Фишера, пользоваться этими формулами, определять конфигурацию асимметрического центра	Оценка за контрольную работу №2 Оценка за реферат №1 Оценка за экзамен
Раздел 3. Основные методы определения и анализа оптически активных веществ.	<i>Знает:</i> – Современные научные достижения и перспективные направления работ в области биомедицинских препаратов; – Современные научные достижения и перспективные направления работ в области оптически активных фармацевтических препаратов; – Основные закономерности влияния пространственного строения органических соединений на их физические и химические свойства, а также на биологическую активность; – Основные пути создания новых видов	Оценка за контрольную работу №3 Оценка за реферат №2 Оценка за экзамен

	и типов оптически активных фармацевтических препаратов. <i>Умеет:</i> – Проводить анализ научно-технической литературы в области современных и перспективных видов биомедицинских препаратов и их технологий; – Применять теоретические знания по современным и перспективным видам оптически активных фармацевтических препаратов для решения исследовательских и прикладных задач, в том числе в междисциплинарных областях. <i>Владеет:</i> – Методами работы с научно-технической, справочной литературой и электронно-библиотечными ресурсами в области биомедицинских препаратов и их технологий; – Методологическими подходами к получению оптически чистых физиологических веществ. – Основными методами определения и анализа оптически активных веществ; – Методами критического анализа и оценки современных научных достижений, генерирования новых идей при решении исследовательских и практических задач в области оптически активных фармацевтических препаратов; – Способностью и готовностью к разработке новых методов исследования и их применению в самостоятельной научно-исследовательской деятельности в области оптически активных веществ.	
Раздел 4. Типы хирального воздействия и основные методы получения оптически активных веществ.	<i>Знает:</i> – Современные научные достижения и перспективные направления работ в области биомедицинских препаратов; – Современные научные достижения и перспективные направления работ в области оптически активных фармацевтических препаратов; – Основные закономерности влияния пространственного строения органических соединений на их физические и химические свойства, а также на биологическую активность;	Оценка за контрольную работу №4 Оценка за реферат №2 Оценка за экзамен

	– Основные пути создания новых видов и типов оптически активных фармацевтических препаратов. <i>Умеет:</i> – Проводить анализ научно-технической литературы в области современных и перспективных видов биомедицинских препаратов и их технологий; – Применять теоретические знания по современным и перспективным видам оптически активных фармацевтических препаратов для решения исследовательских и прикладных задач, в том числе в междисциплинарных областях. <i>Владеет:</i> – Методами работы с научно-технической, справочной литературой и электронно-библиотечными ресурсами в области биомедицинских препаратов и их технологий; – Методологическими подходами к получению оптически чистых физиологических веществ. – Методами критического анализа и оценки современных научных достижений, генерирования новых идей при решении исследовательских и практических задач в области оптически активных фармацевтических препаратов; – Способностью и готовностью к разработке новых методов исследования и их применению в самостоятельной научно-исследовательской деятельности в области оптически активных веществ.	
Раздел 5. Связь стереохимического строения с биологической активностью.	<i>Знает:</i> – Современные научные достижения и перспективные направления работ в области биомедицинских препаратов; – Современные научные достижения и перспективные направления работ в области оптически активных фармацевтических препаратов; – Основные закономерности влияния пространственного строения органических соединений на их физические и химические свойства, а также на биологическую активность; – Основные пути создания новых видов	Оценка за контрольную работу №5 Оценка за реферат №2 Оценка за экзамен

	и типов оптически активных фармацевтических препаратов. <i>Умеет:</i> – Проводить анализ научно-технической литературы в области современных и перспективных видов биомедицинских препаратов и их технологий; – Проводить аналитические исследования состава, структуры и стереохимических свойств фармацевтических препаратов; – Применять теоретические знания по современным и перспективным видам оптически активных фармацевтических препаратов для решения исследовательских и прикладных задач, в том числе в междисциплинарных областях. <i>Владеет:</i> – Методами работы с научно-технической, справочной литературой и электронно-библиотечными ресурсами в области биомедицинских препаратов и их технологий; – Методологическими подходами к получению оптически чистых физиологических веществ. – Методами критического анализа и оценки современных научных достижений, генерирования новых идей при решении исследовательских и практических задач в области оптически активных фармацевтических препаратов; – Способностью и готовностью к разработке новых методов исследования и их применению в самостоятельной научно-исследовательской деятельности в области оптически активных веществ.	

13. ОСОБЕННОСТИ ОРГАНИЗАЦИИ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО ПРОЦЕССА ДЛЯ ИНВАЛИДОВ И ЛИЦ С ОГРАНИЧЕННЫМИ ВОЗМОЖНОСТЯМИ ЗДОРОВЬЯ

Обучение инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья осуществляется в соответствии с:

– Порядком организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры (Приказ Министерства науки и высшего образования Российской Федерации от 06.04.2021 № 245);

– Положением о порядке организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева», принятым решением Ученого совета РХТУ им. Д.И. Менделеева от 28.12.2022, протокол № 5;

– Методическими рекомендациями по организации образовательного процесса для обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья в образовательных организациях высшего образования, в том числе оснащённости образовательного процесса (утверждены заместителем Министра образования и науки РФ А.А. Климовым от 08.04.2014 № АК-44/05вн).

**Дополнения и изменения к рабочей программе дисциплины
«Современные направления и методы получения биомедицинских препаратов»**

**основной образовательной программы
по направлению подготовки 18.04.01 Химическая технология,
магистерская программа – «Химия и технология биологически активных веществ»**

Форма обучения: **очная**

Номер изменения/ дополнения	Содержание дополнения/изменения	Основание внесения изменения/дополнения
1.		протокол заседания Ученого совета № _____ от «___» _____ 20__ г.
		протокол заседания Ученого совета № _____ от «___» _____ 20__ г.
		протокол заседания Ученого совета № _____ от «___» _____ 20__ г.
		протокол заседания Ученого совета № _____ от «___» _____ 20__ г.
		протокол заседания Ученого совета № _____ от «___» _____ 20__ г.

**Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Российский химико-технологический университет
имени Д.И. Менделеева»**

«УТВЕРЖДЕНО»
на заседании Ученого совета
РХТУ им. Д.И. Менделеева
протокол № 1 от «29» августа 2024 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

«Теоретические и экспериментальные методы в химии»

Направление подготовки 18.04.01 Химическая технология

**Магистерская программа:
«Химия и технология биологически активных веществ»**

Квалификация «магистр»

Москва 2024

Программа составлена на кафедре Химии и технологии биомедицинских препаратов.
Авторы программы: д.х.н., проф. Офицеров Е.Н., к.х.н., доц. Крыщенко Ю.К.

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры Химии и технологии биомедицинских препаратов «16» апреля 2024 г., протокол №7.

1. ЦЕЛЬ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ

Программа составлена в соответствии с требованиями Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования – магистратура по направлению подготовки **18.04.01 Химическая технология** (ФГОС ВО), рекомендациями Методической комиссии и накопленным опытом преподавания дисциплины кафедрой Химии и технологии биомедицинских препаратов РХТУ им. Д.И. Менделеева. Программа рассчитана на изучение дисциплины в течение одного семестра.

Дисциплина «Теоретические и экспериментальные методы в химии» относится к общей части дисциплин учебного плана, формируемой участниками образовательных отношений. Программа дисциплины предполагает, что обучающиеся имеют теоретическую и практическую подготовку в области аналитической, физической и органической химии, а также в области современных методов физико-химического анализа органических веществ, изучаемых в рамках программы бакалавриата.

Цель дисциплины – углубленное изучение теоретических основ и особенностей практического применения современных методов исследования структуры и свойств индивидуальных веществ и композиционных материалов и формирование у обучающихся системного подхода к выбору совокупности необходимых методов исследования при решении практических задач научно-исследовательской работы.

Задачи дисциплины:

- изучение номенклатуры и особенностей применения современных физических и физико-химических методов исследования строения и свойств чистых веществ и композиционных материалов;

- ознакомление обучающихся с условиями взаимодействия физических воздействий с веществом, разнообразием возможностей изучения свойств соединений, предоставляемым современными физическими методами исследования: инфракрасной спектроскопией, ядерным магнитным резонансом, электронным парамагнитным резонансом, спектроскопией ионной подвижности, хромато-масс-спектрометрией, иммуноферментными методами и рядом других методов.

- овладение комплексными знаниями о совокупности физических и физико-химических методах исследования, знаниями о технических особенностях их применения и выбора оптимального аналитического подхода при решении прикладных задач выпускной квалификационной работы магистра.

Дисциплина «Теоретические и экспериментальные методы в химии» преподается в 2-м семестре. Контроль успеваемости студентов ведется по принятой в университете рейтинговой системе.

Рабочая программа дисциплины может быть реализована с применением электронных образовательных технологий и электронного обучения полностью или частично.

2. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Изучение дисциплины направлено на приобретение следующих **компетенций и индикаторов их достижения:**

Профессиональные компетенции и индикаторы их достижения:

Задача профессиональной деятельности	Объект или область знания	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК	Основание (профессиональный стандарт, анализ опыта) Обобщенные трудовые функции
Научно-исследовательский тип задач профессиональной деятельности				
Выполнение фундаментальных и прикладных работ поискового, теоретического и экспериментального характера с целью определения технических характеристик новой техники, а также комплекса работ по разработке технологической документации.	Химическое, химико-технологическое производство Сквозные виды профессиональной деятельности в промышленности (в сфере организации и проведения научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ в области химического и химико-технологического производства).	ПК-2. Способен к поиску, обработке, анализу и систематизации научно-технической информации по теме исследования, выбору методик и средств решения задачи	ПК-2.1. Знает алгоритм поиска, оценки и анализа научно-технической информации; ПК-2.2. Умеет обобщать и систематизировать научно-техническую информацию; ПК-2.3. Владеет навыками соотнесения результатов собственной научной работы с отечественным и зарубежным опытом по тематике исследования.	Профессиональный стандарт 40.011 «Специалист по научно-исследовательским и опытно-конструкторским разработкам», утвержденный приказом Министерства труда и социальной защиты Российской Федерации от 04.03.2014 № 121 н, Обобщенная трудовая функция С. Проведение научно-исследовательских и опытно-конструкторских разработок. С /01.6. Осуществление научного руководства проведением исследований по отдельным задачам (уровень квалификации – 6).
		ПК-3. Способен применять современные приборы и методы исследования, планировать, организовывать и проводить эксперименты и испытания, корректно обрабатывать и анализировать полученные результаты	ПК-3.1. Знает экспериментальные методы и их приборное и аппаратное оформление для исследования веществ и материалов; ПК-3.3. Владеет приемами обработки, анализа и представления результатов эксперимента, навыками подготовки научно-технических отчетов.	
		ПК-4. Способен проводить поисковые исследования инновационных технологических процессов в области биологически активных веществ	ПК-4.2. Умеет производить поисковые работы для разработки новых методов получения и анализа биологически активных веществ.	

В результате изучения дисциплины студент магистратуры должен:

Знать:

– номенклатуру и особенности применения современных физических и физико-химических методов исследования строения и свойств чистых веществ и композиционных материалов;

– теоретические основы современных физических и физико-химических методов исследования строения и свойств чистых веществ и композиционных материалов;

Уметь:

– осуществлять выборку необходимых физических и физико-химических методов анализа для комплексного решения аналитических задач при проведении научно-исследовательских работ в области химии и технологии биологически активных веществ;

Владеть:

– комплексными знаниями об особенностях реализации различных физических и физико-химических методов анализа на практике.

3. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Вид учебной работы	Объем дисциплины		
	ЗЕ	Акад. ч.	Астр.ч.
Общая трудоемкость дисциплины	3	108	81
Контактная работа – аудиторные занятия:	0,95	34	25,5
Лекции	0,45	16	2
Практические занятия	0,5	18	13,5
<i>в том числе в форме практической подготовки</i>	<i>0,5</i>	<i>18</i>	<i>13,5</i>
Самостоятельная работа	1,05	38	28,5
Самостоятельное изучение разделов дисциплины	1,05	38	28,5
Вид контроля:			
Экзамен	1	36	27
Контактная работа – промежуточная аттестация	1	0,4	0,3
Подготовка к экзамену.		35,6	26,7
Вид итогового контроля:	Экзамен		

4. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

4.1. Разделы дисциплины и виды занятий

№ п/п	Раздел дисциплины	Академ. часов					
		Всего	в т.ч. в форме пр. подг.	Лекции	Прак. зан.	в т.ч. в форме пр. подг.	Сам. работа
1.	Введение. Физические и физико-химические методы исследования биологически активных веществ и продуктов на их основе	8	2	2	2	2	4
2.	Спектроскопические методы исследования.	46	12	10	12	12	24
2.1	Колебательная спектроскопия.	12	4	2	4	4	6
2.2.	Неразрушающие методы контроля при исследовании БАВ.	8	2	2	2	2	4
2.3.	Спектроскопия ядерного магнитного резонанса.	9	2	2	2	2	5
2.4.	Спектроскопия электронного парамагнитного резонанса	8,5	2	2	2	2	4,5
2.5.	Спектроскопия ионной подвижности	8,5	2	2	2	2	4,5
3.	Иммуноферментный и флюоресцентный методы анализа, их использование в химии, биохимии и медицине.	9	2	2	2	2	5
4.	Методы количественного описания структуры органических веществ и особенности их использования при проведении исследований в области химии биологически активных веществ	9	2	2	2	2	5
	ИТОГО	72	18	16	18	18	38
	Экзамен	36	-	-	-	-	-
	ИТОГО	108	-	-	-	-	-

4.2 Содержание разделов дисциплины

Раздел 1. Введение. Физические и физико-химические методы исследования биологически активных веществ и продуктов на их основе

Основные этапы НИР. Номенклатура и место физических и физико-химических методов исследования в ходе выполнения НИР и контроле производства БАВ. Современные физические методы исследования, классификация физических методов исследования и особенности их использования при решении различных практических задач.

Раздел 2. Спектроскопические методы исследования.

2.1. Колебательная спектроскопия.

Законы поглощения электромагнитного излучения. Основной закон поглощения, закон аддитивности оптических плотностей. Причины отклонений от основного закона поглощения. Условия регистрации электронных спектров поглощения молекул.

Спектроскопические методы. Колебательная спектроскопия: инфракрасные (ИК) и комбинационного рассеяния (КР) спектры. Спектроскопия видимого излучения и УФ-спектроскопия (самостоятельно).

Особенности анализ многокомпонентных систем. Определение числа компонентов. Использование координат изобестических точек и точек экстремумов при анализе спектральных кривых. Простейшие тесты для определения числа компонентов (одно- и двухкомпонентные системы). Выбор аналитических длин волн. Определение коэффициентов поглощения. Селективное определение одного компонента в многокомпонентной системе. Использование производных спектров для идентификации, структурного анализа, анализа многокомпонентных систем и селективного определения одного компонента в многокомпонентных системах. Взаимодействие электро-магнитных полей с веществом. Шкала электромагнитных волн и методы исследования. Использование электромагнитных воздействий в химической технологии.

2.2. Неразрушающие методы контроля при исследовании БАВ. Неразрушающие методы контроля при проведении исследовательских работ по химии БАВ, в ходе контроля готовой продукции на основе БАВ на производстве и обороте сильнодействующих и наркотических веществ. Инфракрасная спектрофотометрия, ее теоретические и методические основы. Ближняя инфракрасная спектроскопия. Скелетные и характеристические колебания в анализе органических веществ. Функциональные группы и характеристические частоты. Улучшение аналитических характеристик за счет Фурье-преобразования.

2.3. Спектроскопия ядерного магнитного резонанса. ЯМР высокого разрешения в жидкостях и твердых телах. Вращение под магическим углом. Метод парамагнитных добавок в ЯМР. Магнитный момент ядра и его взаимодействие с магнитным полем. Условие простого ядерного резонанса. Химический сдвиг сигналов ЯМР. Спин-спиновое взаимодействие и мультиплетность сигналов ЯМР. Спин-решеточная релаксация. Стационарные и импульсные методы регистрации спектра. Применения ЯМР спектроскопии.

2.4. Спектроскопия электронного парамагнитного резонанса. Техника ЭПР спектроскопии. Метод спиновых зондов. Особенности применения метода при решении различных исследовательских и прикладных задач

2.5. Спектроскопия ионной подвижности. Спектроскопия ионной подвижности или «электронный нос». Теоретические основы метода, направления практического использования. Особенности детектирования веществ различного строения. Преимущества и недостатки по сравнению с методами газовой или жидкостной хроматографии.

Раздел 3. Иммуноферментный и флюоресцентный методы анализа, их использование в химии, биохимии и медицине. Теоретические основы методов

иммуноферментного и флюоресцентного анализа. Особенности применения при решении различных практических задач в области химии БАВ, биохимии и медицине.

Раздел 4. Методы количественного описания структуры органических веществ и особенности их использования при проведении исследований в области химии биологически активных веществ. Геометрическая и электронная структура молекул. Методы количественного описания структуры (топологические, методы, основанные на моменте инерции вращательного движения, потенциал ионизации и энергия сродства к электрону). Построение зависимостей структура-свойство. Особенности применения методов при решении различных исследовательских задач в области химии БАВ.

5. СООТВЕТСТВИЕ СОДЕРЖАНИЯ ТРЕБОВАНИЙ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

№	В результате освоения дисциплины студент должен:		Раздел 1	Раздел 2	Раздел 3	Раздел 4
	Знать:					
1	– номенклатуру и особенности применения современных физических и физико-химических методов исследования строения и свойств чистых веществ и композиционных материалов;		+	+	+	+
2	– теоретические основы современных физических и физико-химических методов исследования строения и свойств чистых веществ и композиционных материалов;		+	+	+	+
	Уметь:					
3	– осуществлять выборку необходимых физических и физико-химических методов анализа для комплексного решения аналитических задач при проведении научно-исследовательских работ в области химии и технологии биологически активных веществ;		+	+	+	+
	Владеть:					
4	– комплексными знаниями об особенностях реализации различных физических и физико-химических методов анализа на практике.		+	+	+	+
В результате освоения дисциплины студент должен приобрести следующие <i>профессиональные компетенции и индикаторы их достижения:</i>						
	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК				
5	ПК-2. Способен к поиску, обработке, анализу и систематизации научно-технической информации по теме исследования, выбору методик и средств решения задачи	ПК-2.1. Знает алгоритм поиска, оценки и анализа научно-технической информации;	+	+	+	+
		ПК-2.2. Умеет обобщать и систематизировать научно-техническую информацию;	+	+	+	+
		ПК-2.3. Владеет навыками соотнесения результатов собственной научной работы с отечественным и зарубежным опытом по тематике исследования.	+	+	+	+
6	ПК-3. Способен применять современные приборы и методы исследования, планировать,	ПК-3.1. Знает экспериментальные методы и их приборное и аппаратное оформление для исследования веществ и материалов;	+	+	+	+

	организовывать и проводить эксперименты и испытания, корректно обрабатывать и анализировать полученные результаты	ПК-3.3. Владеет приемами обработки, анализа и представления результатов эксперимента, навыками подготовки научно-технических отчетов.		+	+	+
	ПК-4 Способен проводить поисковые исследования инновационных технологических процессов в области биологически активных веществ	ПК-4.2 Умеет производить поисковые работы для разработки новых методов получения и анализа биологически активных веществ.	+	+	+	+

6. ПРАКТИЧЕСКИЕ И ЛАБОРАТОРНЫЕ ЗАНЯТИЯ

6.1. Практические занятия

Примерные темы практических занятий по дисциплине.

№ п/п	№ раздела дисциплины	Темы практических занятий	Часы
1	1	Номенклатура и место физических и физико-химических методов исследования в ходе выполнения НИР и контроле производства БАВ. Современные физические методы исследования, классификация физических методов исследования и особенности их использования при решении различных практических задач.	2
2	2	Спектроскопические методы. Колебательная спектроскопия: инфракрасные (ИК) и комбинационного рассеяния (КР) спектры. Спектроскопия видимого излучения и УФ-спектроскопия (самостоятельно). Особенности применения, недостатки, возможности методов при решении практических задач.	2
		Особенности анализа многокомпонентных систем спектроскопическими методами. Определение числа компонентов. Простейшие тесты для определения числа компонентов (одно- и двухкомпонентные системы). Выбор аналитических длин волн. Определение коэффициентов поглощения. Селективное определение одного компонента в многокомпонентной системе.	2
3		Неразрушающие методы контроля при проведении исследовательских работ по химии БАВ, в ходе контроля готовой продукции на основе БАВ на производстве и обороте сильнодействующих и наркотических веществ.	2
4		ЯМР высокого разрешения в жидкостях и твердых телах	2
5		Техника ЭПР спектроскопии. Метод спиновых зондов. Особенности применения метода при решении различных исследовательских и прикладных задач	2
6		Спектроскопия ионной подвижности или «электронный нос». Особенности детектирования веществ различного строения. Преимущества и недостатки по сравнению с методами газовой или жидкостной хроматографии.	2
8	3	Особенности применения иммуноферментного и флюоресцентного методов при решении различных практических задач в области химии БАВ, биохимии и медицине.	2
9	4	Методы количественного описания структуры (топологические, методы, основанные на моменте инерции вращательного движения, потенциал ионизации и энергия сродства к электрону). Построение зависимостей структур-свойство. Особенности применения методов при решении различных исследовательских задач в области химии БАВ.	2

7. САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА

Самостоятельная работа проводится с целью углубления знаний по дисциплине и предусматривает:

- ознакомление и проработку рекомендованной литературы, работу с электронно-библиотечными системами, включая переводы публикаций из научных журналов, цитируемых в базах Scopus, Web of Science, Chemical Abstracts, РИНЦ;
- посещение отраслевых выставок и семинаров;
- участие в семинарах РХТУ им. И. Менделеева по тематике дисциплины;
- подготовку к выполнению контрольных работ по материалу лекционного курса;
- подготовку реферата по тематике дисциплины на основе проработки рекомендованной литературы и работы с электронно-библиотечными системами;
- подготовку к сдаче экзамена по дисциплине.

Планирование времени на самостоятельную работу, необходимого на изучение дисциплины, студентам лучше всего осуществлять на весь период изучения, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала. Материал, законспектированный на лекциях, необходимо регулярно дополнять сведениями из литературных источников, представленных в рабочей программе. При работе с указанными источниками рекомендуется составлять краткий конспект материала, с обязательным фиксированием библиографических данных источника.

8. ПРИМЕРЫ ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ КОНТРОЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Совокупная оценка по дисциплине складывается из оценок за выполнение контрольных работ (максимальная оценка 40 баллов), реферата (максимальная оценка 20 баллов) и итогового контроля в форме экзамена (максимальная оценка 40 баллов).

8.1. Примерная тематика реферативно-аналитической работы.

Примерная тематика рефератов

1. Ультрафиолетовая спектроскопия
2. Рентгеновская спектроскопия
3. Спектроскопия ионной подвижности. Основы метода. Особенности детектирования веществ.
4. Преимущества и недостатки СИП по сравнению с методом газовой или жидкостной хроматографии
5. Применение СПИ
6. Микроволновая спектроскопия
7. Вращательное движение и его характеристики
8. Терагерцовая спектроскопия
9. Масс-спектрометрия
10. Спектроскопия комбинационного рассеяния света
11. Геометрическая и электронная структура молекул.
12. Методы количественного описания структуры (топологические, методы, основанные на моменте инерции вращательного движения, потенциал ионизации и энергия сродства к электрону).
13. Построение зависимостей структура-свойство с использованием топологического индекса Винера.
14. Ядерный магнитный резонанс (знание основ, химсдвиги и КССВ, характеристики функциональных групп, умение решать задачи по установлению строения

- органических соединений)
15. Электронный парамагнитный резонанс
 16. Методы флюоресценции в химии, биологии и медицине
 17. Неразрушающие методы контроля в химии, медицине, контроле БАВ. БИК-спектроскопия
 18. Спектроскопия ионной подвижности и её использование
 19. Рентгеновская спектроскопия (знание основ для МО-11, остальные на уровне понятий)
 20. Люминесцентный анализ в химии, биохимии и биологии.

8.2. Примеры контрольных вопросов для текущего контроля освоения дисциплины

Для текущего контроля предусмотрено 2 контрольных работы (контрольная работа №1 по разделу №2 и контрольная работа №2 по разделам № 3 и 4). Максимальная оценка за контрольные работы 1 и 2 составляет 20 баллов за каждую.

Раздел 1. Примеры вопросов к контрольной работе № 1. Контрольная работа содержит 2 вопроса, по 10 баллов за вопрос.

1. Анализ многокомпонентных систем. Определение числа компонентов.
2. Использование координат изобестических точек и точек экстремумов при анализе спектральных кривых.
3. Простейшие тесты для определения числа компонентов (одно- и двухкомпонентные системы).
4. Выбор аналитических длин волн.
5. Определение коэффициентов поглощения.
6. Использование производных спектров для идентификации, структурного анализа, анализа многокомпонентных систем и селективного определения одного компонента в многокомпонентных системах.
7. Виды спектроскопии на уровне понятий: атомная спектроскопия — исследование энергетических переходов между состояниями электронов на атомных орбиталях
8. Атомно-абсорбционная спектроскопия
9. Атомно-эмиссионная спектроскопия
10. Атомная флуоресценция
11. молекулярная спектроскопия — исследование энергетических переходов между электронными, колебательными и вращательными уровнями энергии молекул (основные понятия включая законы поглощения)
12. Фотоэлектронная спектроскопия
13. Оптическая спектроскопия в видимом диапазоне длин волн
14. Инфракрасная спектроскопия (знание основ, типы колебаний, характеристики функциональных групп и умение решать задачи по установлению строения органических соединений)
15. Типы колебаний: валентные и деформационные.
16. Функциональные группы и характеристические частоты.
17. Таблицы характеристических частот.
18. Водородные связи в ИК-спектроскопии.
19. Ультрафиолетовая спектроскопия
20. Рентгеновская спектроскопия
21. Спектроскопия ионной подвижности. Основы метода. Особенности детектирования веществ.
22. Преимущества и недостатки СИП по сравнению с методом газовой или жидкостной хроматографии
23. Применение СПИ

24. Микроволновая спектроскопия.
25. Вращательное движение и его характеристики

Раздел 2. Примеры вопросов к контрольной работе № 2. Контрольная работа содержит 2 вопроса, по 10 баллов за вопрос.

1. Взаимосвязь структура-свойство
2. Математические методы в химии
3. Топология и топологические индексы в химии
4. Хроматографические методы и их использование в биохимии.
5. Колоночная хроматография
6. Ионно-обменная хроматография
7. Носители и элюенты, детекция и типы детекторов в ГЖХ и ВЭЖХ.
8. Методы количественного описания структуры (топологические, методы, основанные на моменте инерции вращательного движения, потенциал ионизации и энергия сродства к электрону).
9. Построение зависимостей структура-свойство с использованием топологического индекса Винера.
- 10.

**8.3. Вопросы для итогового контроля освоения дисциплины
(2 семестр – экзамен)**

Экзаменационный включает контрольные вопросы по всем разделам рабочей программы дисциплины и содержит 4 вопроса по 10 баллов.

1. Классификация методов исследования в химии
2. Соотношение между теоретическими и экспериментальными методами в химии
3. Организация научного исследования с точки зрения выбора аналитических методов
4. Уровни исследования строения вещества
5. Описание свойств веществ и их классификация
6. Методы исследования свойств вещества: классификация и взаимосвязь
7. Взаимосвязь структура-свойство
8. Математические методы в химии
9. Топология и топологические индексы в химии
10. Хроматографические методы и их использование в биохимии.
11. Колоночная хроматография,
12. Ионно-обменная хроматография,
13. Носители и элюенты, детекция и типы детекторов в ГЖХ и ВЭЖХ.
14. Масс-спектрометрия, методы ионизации.
15. Хромато-масс-спектрометрия
16. Основной закон поглощения, закон аддитивности оптических плотностей.
17. Причины отклонений от основного закона поглощения.
18. Условия регистрации электронных спектров поглощения молекул.
19. Анализ многокомпонентных систем. Определение числа компонентов.
20. Использование координат изобестических точек и точек экстремумов при анализе спектральных кривых.
21. Простейшие тесты для определения числа компонентов (одно- и двухкомпонентные системы).
22. Выбор аналитических длин волн.
23. Определение коэффициентов поглощения.
24. Селективное определение одного компонента в многокомпонентной системе.
25. Использование производных спектров для идентификации, структурного анализа, анализа многокомпонентных систем и селективного определения одного

компонента в многокомпонентных системах.

26. Виды спектроскопии на уровне понятий: атомная спектроскопия — исследование энергетических переходов между состояниями электронов на атомных орбиталях
27. Атомно-абсорбционная спектроскопия
28. Атомно-эмиссионная спектроскопия
29. Атомная флуоресценция
30. молекулярная спектроскопия — исследование энергетических переходов между электронными, колебательными и вращательными уровнями энергии молекул (основные понятия включая законы поглощения)
31. Фотоэлектронная спектроскопия
32. Оптическая спектроскопия в видимом диапазоне длин волн
33. Инфракрасная спектроскопия (знание основ, типы колебаний, характеристики функциональных групп и умение решать задачи по установлению строения органических соединений)
34. Типы колебаний: валентные и деформационные.
35. Функциональные группы и характеристические частоты.
36. Таблицы характеристических частот.
37. Водородные связи в ИК-спектроскопии.
38. Ультрафиолетовая спектроскопия
39. Рентгеновская спектроскопия
40. Спектроскопия ионной подвижности. Основы метода. Особенности детектирования веществ.
41. Преимущества и недостатки СИП по сравнению с методом газовой или жидкостной хроматографии
42. Применение СПИ
43. Микроволновая спектроскопия
44. Вращательное движение и его характеристики
45. Терагерцовая спектроскопия
46. Масс-спектрометрия (знание для МО-17, для остальных понятия)
47. Спектроскопия комбинационного рассеяния света
48. Геометрическая и электронная структура молекул.
49. Методы количественного описания структуры (топологические, методы, основанные на моменте инерции вращательного движения, потенциал ионизации и энергия сродства к электрону).

Фонд оценочных средств приведен в виде отдельного документа, являющегося неотъемлемой частью основной образовательной программы.

8.4. Структура и примеры билетов для экзамена

Экзамен по дисциплине «Теоретические и экспериментальные методы в химии» проводится во 2-м семестре и включает контрольные вопросы по всем разделам рабочей программы дисциплины. Билет для экзамена состоит из 4 вопросов, относящихся к указанным разделам.

Пример билета для экзамена:

<i>«Утверждаю»</i> Зав. каф. ХТБМП _____ М.С. Ощепков «__» _____ 20__ г.	Министерство науки и высшего образования РФ
	Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева
	Кафедра химии и технологии биомедицинских препаратов
	18.04.01 Химическая технология
	Магистерская программа – «Химия и технология биологически активных веществ»
	«Теоретические и экспериментальные методы в химии»
Билет № 1 1. Методы исследования свойств вещества: классификация и взаимосвязь. 2. Основной закон поглощения, закон аддитивности оптических плотностей. 3. Носители и элюенты, детекция и типы детекторов в ГЖХ и ВЭЖХ 4. Методы количественного описания структуры (топологические, методы, основанные на моменте инерции вращательного движения, потенциал ионизации и энергия сродства к электрону).	

9. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

9.1. Рекомендуемая литература

А. Основная литература

1. Петрухин О.М. (ред.). Аналитическая химия. Физические и физико-химические методы анализа. Учебник для вузов - М.: Химия, 2001. – 497 с. (Базовый учебник).
2. Поливанова А.Г. Высокоэффективная жидкостная хроматография биологически активных веществ. Лабораторный практикум: Учеб. пособие - М.: Издательство РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2013. - 55 с.
3. Винарский В.А. Юрченко Р.А. Коваленко А.Е., Кузовлев. В. Ю., Гладырев В.В. Масс- спектрометрия и хромато-масс-спектральный анализ: Учебное пособие. – М.: РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2013. - 143с
4. Воловенко Ю.М., Карцев В.Г., Комаров И.В., Туров А.В., Хиля В.П. Спектроскопия ядерного магнитного резонанса для химиков. «Научное Партнерство», 2011.
5. Ермоленко Ю.В., Калистратова А.В. Капиллярный электрофорез. Теоретические основы и практическое руководство. Лабораторный практикум: учебное пособие – М.: Издательство РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2021 г. – 128 с.

Б. Дополнительная литература

1. Гэри К. Аналитическая химия: в 2 т.: пер. с англ //М.: БИНОМ. Лаборатория знаний. – 2009. – Т. 1. – С. 623.
2. Сильверстейн Р, Вебстер Ф., Кимл Д., Спектрометрическая идентификация органических соединений / М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2012. - 557 с.
3. Лебедев А. Т. Масс-спектрометрия в органической химии. - М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, - 2003. - 493 с.
4. Пентин Ю. А., Курамшина Г. М. Основы молекулярной спектроскопии. – Мир, 2008.
5. Отто М. Современные методы аналитической химии (в 2-х томах). Учебник. – М.: Техносфера, 2008. – 544 с.
6. Кристиан Г. Аналитическая химия (в 2-х томах). Учебник. – М: Лаборатория знаний, 2013, том 1 - 623 с., том 2 - 504 с.

9.2. Рекомендуемые источники научно-технической информации

- Журнал аналитической химии. ISSN: 0044-4502
- Journal of Analytical Chemistry. ISSN: 0003-2700
- Journal of Chromatography A. ISSN: 0021-9673
- Journal of Mass Spectrometry ISSN: 1076-5174
- Ресурсы ELSEVIER: www.sciencedirect.com.

10. ПЕРЕЧЕНЬ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ В ОБРАЗОВАТЕЛЬНОМ ПРОЦЕССЕ

Информационную поддержку изучения дисциплины осуществляет Информационно-библиотечный центр (ИБЦ) РХТУ им. Д.И. Менделеева, который обеспечивает обучающихся основной учебной, учебно-методической и научной литературой, необходимой для организации образовательного процесса по дисциплине. Общий объем многоотраслевого фонда ИБЦ на 01.01.2024 г. составляет 1 559 436 экз.

Фонд ИБЦ располагает учебной, учебно-методической и научно-технической литературой в форме печатных и электронных изданий, а также включает официальные, справочно-библиографические, специализированные отечественные и зарубежные периодические и информационные издания. ИБЦ обеспечивает доступ к профессиональным базам данных, информационным, справочным и поисковым системам.

Каждый обучающийся обеспечен свободным доступом из любой точки, в которой имеется доступ к сети Интернет и к электронно-библиотечной системе (ЭБС) Университета, которая содержит различные издания по основным изучаемым дисциплинам и сформирована по согласованию с правообладателями учебной и учебно-методической литературы.

Для более полного и оперативного справочно-библиографического и информационного обслуживания в ИБЦ реализована технология Электронной доставки документов.

Полный перечень электронных информационных ресурсов, используемых в процессе обучения, представлен в основной образовательной программе.

11. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

В соответствии с учебным планом занятия по дисциплине «Теоретические и экспериментальные методы в химии» проводятся в форме лекций, практических занятий и самостоятельной работы обучающегося.

11.1. Оборудование, необходимое в образовательном процессе:

Лекционная учебная аудитория, оборудованная электронными средствами демонстрации (компьютер со средствами звуковоспроизведения, проектор, экран) и учебной мебелью; библиотека, имеющая рабочие компьютерные места для студентов, оснащенные компьютерами с доступом к базам данных и выходом в Интернет.

11.2. Учебно-наглядные пособия:

Иллюстрации к разделам лекционного курса и практическим занятиям; графики и таблицы, иллюстрирующие лекционный материал, эталонные спектры и хроматограммы.

11.3. Компьютеры, информационно-телекоммуникационные сети, аппаратно-программные и аудиовизуальные средства:

Персональные компьютеры в аудитории для самостоятельной подготовки обучающихся, укомплектованные принтерами и программными средствами; проекторы и

экраны; цифровые камеры; копировальные аппараты; локальная сеть с выходом в Интернет.

11.4. Печатные и электронные образовательные и информационные ресурсы:

Электронные образовательные ресурсы: электронные презентации к разделам лекционного курса; учебно-методические разработки в электронном виде; справочные материалы в печатном и электронном виде; кафедральная библиотека электронных изданий, выпускных квалификационных и диссертационных работ, выполненных аспирантами и сотрудниками кафедры.

11.5. Перечень лицензионного программного обеспечения:

№ п/п	Наименование программного продукта	Реквизиты договора поставки	Примечание	Срок окончания действия лицензии
1.	Microsoft Office Standard 2013	Контракт № 62-64ЭА/2013 от 02.12.2013	Лицензия на ПО, принимающее участие в образовательных процессах.	бессрочная
2.	Microsoft Office Professional Plus 2019 В составе: Word, Excel, Power Point, Outlook, OneNote, Access, Publisher, InfoPath	Контракт № 28-35ЭА/2020 от 26.05.2020	Лицензия на ПО, принимающее участие в образовательных процессах.	12 месяцев (ежегодное продление подписки с правом перехода на обновлённую версию продукта)
3.	Kaspersky Endpoint Security для бизнеса – Стандартный Russian Edition.	Контракт № 90-133ЭА/2021 от 07.09.2021	Лицензия на ПО, не принимающее прямого участия в образовательных процессах (инфраструктурное/ вспомогательное ПО)	12 месяцев (ежегодное продление подписки с правом перехода на обновлённую версию продукта)
4.	«Антиплагиат.ВУЗ 5.0»	Контракт от 08.05.2024 №34-523К/2024	Лимит проверок 10 000	19.05.2025

12. ТРЕБОВАНИЯ К ОЦЕНКЕ КАЧЕСТВА ОСВОЕНИЯ ПРОГРАММЫ

Наименование разделов	Основные показатели оценки	Формы и методы контроля и оценки
Раздел 1. Введение. Физические и физико-химические методы исследования биологически активных веществ и продуктов на их основе	<i>Знает:</i> – номенклатуру и особенности применения современных физических и физико-химических методов исследования строения и свойств чистых веществ и композиционных материалов; – теоретические основы современных	Оценка за реферат Оценка за экзамен

	физических и физико-химических методов исследования строения и свойств чистых веществ и композиционных материалов; <i>Умеет:</i> – осуществлять выборку необходимых физических и физико-химических методов анализа для комплексного решения аналитических задач при проведении научно-исследовательских работ в области химии и технологии биологически активных веществ; <i>Владеет:</i> – комплексными знаниями об особенностях реализации различных физических и физико-химических методов анализа на практике.	
Раздел 2. Спектроскопические методы исследования.	<i>Знает:</i> – номенклатуру и особенности применения современных физических и физико-химических методов исследования строения и свойств чистых веществ и композиционных материалов; – теоретические основы современных физических и физико-химических методов исследования строения и свойств чистых веществ и композиционных материалов; <i>Умеет:</i> – осуществлять выборку необходимых физических и физико-химических методов анализа для комплексного решения аналитических задач при проведении научно-исследовательских работ в области химии и технологии биологически активных веществ; <i>Владеет:</i> – комплексными знаниями об особенностях реализации различных физических и физико-химических методов анализа на практике.	Оценка за контрольную работу №1 Оценка за реферат Оценка за экзамен

Раздел 3. Иммуноферментный и флюоресцентный методы анализа, их использование в химии, биохимии и медицине.	<i>Знает:</i> – номенклатуру и особенности применения современных физических и физико-химических методов исследования строения и свойств чистых веществ и композиционных материалов; – теоретические основы современных физических и физико-химических методов исследования строения и свойств чистых веществ и композиционных материалов; <i>Умеет:</i> – осуществлять выборку необходимых физических и физико-химических методов анализа для комплексного решения аналитических задач при проведении научно-исследовательских работ в области химии и технологии биологически активных веществ; <i>Владеет:</i> – комплексными знаниями об особенностях реализации различных физических и физико-химических методов анализа на практике.	Оценка за контрольную работу №2 Оценка за реферат Оценка за экзамен
Раздел 4. Методы количественного описания структуры органических веществ и особенности их использования при проведении исследований в области химии биологически активных веществ.	<i>Знает:</i> – номенклатуру и особенности применения современных физических и физико-химических методов исследования строения и свойств чистых веществ и композиционных материалов; – теоретические основы современных физических и физико-химических методов исследования строения и свойств чистых веществ и композиционных материалов; <i>Умеет:</i> – осуществлять выборку необходимых физических и физико-химических методов анализа для комплексного решения аналитических задач при проведении научно-исследовательских работ в области химии и технологии биологически активных веществ; <i>Владеет:</i> – комплексными знаниями об особенностях реализации различных физических и физико-химических методов анализа на практике.	Оценка за контрольную работу №2 Оценка за реферат Оценка за экзамен

13. ОСОБЕННОСТИ ОРГАНИЗАЦИИ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО ПРОЦЕССА ДЛЯ ИНВАЛИДОВ И ЛИЦ С ОГРАНИЧЕННЫМИ ВОЗМОЖНОСТЯМИ ЗДОРОВЬЯ

Обучение инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья осуществляется в соответствии с:

– Порядком организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры (Приказ Министерства науки и высшего образования Российской Федерации от 06.04.2021 № 245);

– Положением о порядке организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева», принятым решением Ученого совета РХТУ им. Д.И. Менделеева от 28.12.2022, протокол № 5;

– Методическими рекомендациями по организации образовательного процесса для обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья в образовательных организациях высшего образования, в том числе оснащённости образовательного процесса (утверждены заместителем Министра образования и науки РФ А.А. Климовым от 08.04.2014 № АК-44/05вн).

Дополнения и изменения к рабочей программе дисциплины

«Теоретические и экспериментальные методы в химии»

основной образовательной программы

**по направлению подготовки 18.04.01 Химическая технология,
магистерская программа – «Химия и технология биологически активных веществ»**

Форма обучения: **очная**

Номер изменения/дополнения	Содержание дополнения/изменения	Основание внесения изменения/дополнения
1.		протокол заседания Ученого совета № _____ от «___» _____ 20__ г.
		протокол заседания Ученого совета № _____ от «___» _____ 20__ г.
		протокол заседания Ученого совета № _____ от «___» _____ 20__ г.
		протокол заседания Ученого совета № _____ от «___» _____ 20__ г.
		протокол заседания Ученого совета № _____ от «___» _____ 20__ г.

**Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Российский химико-технологический университет
имени Д.И. Менделеева»**

«УТВЕРЖДЕНО»
на заседании Ученого совета
РХТУ им. Д.И. Менделеева
протокол № 1 от «29» августа 2024 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

«Токсикологическая химия»

Направление подготовки 18.04.01 Химическая технология

**Магистерская программа:
«Химия и технология биологически активных веществ»**

Квалификация «магистр»

Москва 2024

Программа составлена на кафедре Химии и технологии биомедицинских препаратов.
Авторы программы: д.х.н., профессор Коваленко Л.В., к.х.н., доц. Ткаченко С.В.

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры Химии и технологии биомедицинских препаратов «16» апреля 2024 г., протокол №7.

1. ЦЕЛЬ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ

Программа составлена в соответствии с требованиями Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования – магистратура по направлению подготовки 18.04.01 Химическая технология (ФГОС ВО), рекомендациями Методической комиссии и накопленным опытом преподавания дисциплины кафедрой Химии и технологии биомедицинских препаратов РХТУ им. Д.И. Менделеева. Программа рассчитана на изучение дисциплины в течение одного семестра.

Дисциплина «Токсикологическая химия» относится к дисциплинам по выбору части дисциплин учебного плана, формируемой участниками образовательных отношений. Программа дисциплины предполагает, что обучающиеся имеют теоретическую и практическую подготовку в области органической химии, биохимии, а также в области химии биологически активных веществ.

Цель дисциплины – приобретение обучающимися углубленных знаний в области токсических процессов, взаимосвязей «структура – свойства – токсичность» для биологически активных веществ, основных видов токсических процессов, специальных токсических процессов и механизмов избирательной токсичности.

Задачи дисциплины:

- формирование у магистрантов фундаментальной токсикологической базы и системных углубленных знаний в области токсикологии биологически активных веществ;
- выработка системного подхода к постановке, выполнению и анализу результатов научных исследований в области токсикологической химии.

Дисциплина «Токсикологическая химия» преподается во 2-м семестре. Контроль успеваемости студентов ведется по принятой в университете рейтинговой системе.

Рабочая программа дисциплины может быть реализована с применением электронных образовательных технологий и электронного обучения полностью или частично.

2. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Изучение дисциплины направлено на приобретение следующих **компетенций и индикаторов их достижения:**

Профессиональные компетенции и индикаторы их достижения:

Задача профессиональной деятельности	Объект или область знания	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК	Основание (профессиональный стандарт, анализ опыта) Обобщенные трудовые функции
Научно-исследовательский тип задач профессиональной деятельности				
Выполнение фундаментальных и прикладных работ поискового, теоретического и экспериментального характера с целью определения технических характеристик новой техники, а также комплекса работ по разработке технологической документации.	Химическое, химико-технологическое производство Сквозные виды профессиональной деятельности в промышленности (в сфере организации и проведения научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ в области химического и химико-технологического производства).	ПК-2. Способен к поиску, обработке, анализу и систематизации научно-технической информации по теме исследования, выбору методик и средств решения задачи	ПК-2.1. Знает алгоритм поиска, оценки и анализа научно-технической информации; ПК-2.2. Умеет обобщать и систематизировать научно-техническую информацию; ПК-2.3. Владеет навыками соотнесения результатов собственной научной работы с отечественным и зарубежным опытом по тематике исследования.	Профессиональный стандарт 40.011 «Специалист по научно-исследовательским и опытно-конструкторским разработкам», утвержденный приказом Министерства труда и социальной защиты Российской Федерации от 04.03.2014 № 121 н, Обобщенная трудовая функция С. Проведение научно-исследовательских и опытно-конструкторских разработок. С /01.6. Осуществление научного руководства проведением исследований по отдельным задачам (уровень квалификации – 6).
		ПК-4 Способен проводить поисковые исследования инновационных технологических процессов в области биологически активных веществ	ПК-4.2 Умеет производить поисковые работы для разработки новых методов получения и анализа биологически активных веществ.	
		ПК-5 Способен осуществлять самостоятельные научные исследования в области химии и технологии	ПК-5.1. Знает методы получения, особенности производства, свойства и механизмы действия биологически активных веществ различных классов; ПК-5.2. Знает теоретические основы	

		биологически активных веществ	функционирования живых организмов в норме и при патологии, необходимые для осуществления научных исследований по химии биологически активных веществ; ПК-5.3. Умеет использовать теоретические знания по химии и технологии биологически активных веществ для решения конкретных задач научно-исследовательской деятельности.	

В результате изучения дисциплины студент магистратуры должен:

Знать:

- Современные научные достижения и перспективные направления работ в области химической токсикологии;
- Современные физико-химические, химические, фотохимические, кинетические и термодинамические представления о токсических свойствах биологически активных веществ;
- Основные типы и предпосылки развития токсических процессов, а также основы их патохимической и патофизиологической стадии;
- Основные пути формирования ксенобиотического профиля среды, источники поступления в среду ксенобиотиков и механизмы их возможного накопления и деградации.

Уметь:

- Проводить анализ научной литературы в области современных исследований в области токсикологической химии;
- Формулировать требования к работе с различными группами токсикантов;
- Формулировать возможные механизмы поражения новыми синтетическими биологически активными веществами;
- Применять теоретические знания по химической токсикологии для решения исследовательских и прикладных задач, в том числе в междисциплинарных областях.

Владеть:

- Методами работы с научной, справочной литературой и электронно-библиотечными ресурсами по теоретическим и прикладным основам токсикологической химии и токсикологических исследований;
- Методологическими подходами, особенностями выявления взаимосвязей структуры и токсических свойств БАВ, обеспечивающих обоснованное принятие решений при разработке новых веществ с потенциальным биологически активным действием;
- Методами критического анализа и оценки современных научных достижений в области токсикологической химии, генерирования новых идей при решении исследовательских и практических задач в данной области;
- Способностью и готовностью к разработке новых методов исследования и их применению в самостоятельной научно-исследовательской деятельности в области химической токсикологии с учетом правил соблюдения авторских прав.

3. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Вид учебной работы	Объем дисциплины		
	ЗЕ	Акад. ч.	Астр. ч.
Общая трудоемкость дисциплины	2	72	54
Контактная работа – аудиторные занятия:	0,94	34	25,5
Лекции	0,47	17	12,75
Практические занятия	0,47	17	12,75
в том числе в форме практической подготовки	0,47	17	12,75
Самостоятельная работа	1,06	38	28,5
Контактная самостоятельная работа	1,06	0,4	0,3
Самостоятельное изучение разделов дисциплины		37,6	28,2
Вид итогового контроля:	Зачет с оценкой		

4. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

4.1. Разделы дисциплины и виды занятий

№ п/п	Раздел дисциплины	Академ. часов					
		Всего	в т.ч. в форме пр. подг.	Лекции	Прак. зан.	в т.ч. в форме пр. подг.	Сам. работа
1	Основные положения токсикологии: биосистемы – мишени действия токсикантов	12	2	4	2	2	6
1.1	Введение. Основные положения токсикологии	4	-	2	-	-	2
1.2	Биосистемы – мишени действия токсикантов. Основные группы ксенобиотиков и токсикантов	8	2	2	2	2	4
2	Свойства токсиканта, определяющие его токсичность, токсикокинетика и токсикодинамика	24	4	7	4	4	13
2.1	Механизмы токсического действия. Свойства ксенобиотика, определяющие токсичность	11	2	3	2	2	6
2.2	Механизмы цитотоксичности. Факторы, влияющие на токсичность.	13	2	4	2	2	7
3.	Избирательная токсичность и специальные виды токсического действия	26	9	4	9	9	13
3.1	Специальные виды токсического действия	12	5	2	5	5	7
3.2	Избирательная токсичность. Избирательно действующие токсиканты.	14	4	2	4	4	6
4.	Основы экотоксикологии	10	2	2	2	2	6
	ИТОГО	72	17	17	17	17	38

4.2 Содержание разделов дисциплины

Раздел 1. Основные положения токсикологии: биосистемы – мишени действия токсикантов.

1.1. Ведение. Основные положения токсикологии. Предмет и задачи токсикологии. Общественная значимость токсикологии и промышленных производств.

1.2. Биосистемы – мишени действия токсикантов. Основные группы ксенобиотиков и токсикантов. Токсикант. Ксенобиотик. Краткая характеристика отдельных групп токсикантов. Токсиканты биологического происхождения. Неорганические соединения естественного происхождения. Органические соединения естественного происхождения. Синтетические токсиканты. Пестициды. Органические растворители. Лекарства, пищевые добавки, косметические средства. Боевые отравляющие вещества (БОВ).

Раздел 2. Свойства токсиканта, определяющие его токсичность, токсикокинетика и токсикодинамика

2.1. Биосистемы - мишени действия токсикантов. Уровни организации материи. Особенности взаимодействия ксенобиотиков с биосистемами. Термодинамика биосистем. Термодинамические аспекты токсичности. Фундаментальные свойства живых систем. Токсиканты, как модуляторы фундаментальных свойств живых систем.

Свойства токсиканта, определяющие его токсичность. Размеры молекулы. Геометрия молекулы токсиканта. Физико-химические свойства вещества. Стабильность в среде. Химические свойства.

Токсикодинамика. Механизмы токсического действия. Определение понятия "рецептор" в токсикологии. Действие токсиканта на элементы межклеточного пространства. Действие токсикантов на структурные элементы клеток. Взаимодействие токсикантов с белками. Локализация рецепторов. Понятие полирецепторного профиля связывания токсиканта

2.2. Механизмы цитотоксичности. Нарушение процессов биоэнергетики. Нарушение гомеостаза внутриклеточного кальция. Активация свободно-радикальных процессов в клетке. Повреждение мембранных структур. Повреждение процессов синтеза белка и клеточного деления.

Действие токсикантов на биологические механизмы регуляции клеточной активности. Прямое межклеточное взаимодействие. Механизмы гуморальной регуляции. Механизмы нервной регуляции. Особенности токсического повреждения механизмов регуляции клеточной активности.

Метаболизм ксенобиотиков. Концепция I и II фазы метаболизма ксенобиотиков. Локализация процесса биотрансформации. Первая фаза метаболизма. Окислительно-восстановительные превращения. Гидролитические превращения. Вторая фаза метаболизма. Конъюгация. Факторы, влияющие на метаболизм ксенобиотиков. Активные метаболиты и их роль в инициации токсического процесса.

Факторы, влияющие на токсичность. Особенности биосистем и их влияние на чувствительность к ксенобиотикам. Генетически обусловленные особенности реакций организма на действие токсикантов. Необусловленные генетически особенности реакции организма на действие токсикантов. Явления, наблюдаемые при длительном воздействии токсиканта. Толерантность. Виды толерантности. Некоторые механизмы толерантности. Химическая зависимость.

Раздел 3. Избирательная токсичность и специальные виды токсического действия

3.1. Специальные виды токсического действия. Иммунотоксичность. Действие токсикантов на иммунную систему. Понятие иммунотоксичности. Иммуносупрессия. Гиперчувствительность (аллергия). Характеристика состояния гиперчувствительности. Химический мутагенез. Условия действия мутагенов на клетки. Изучение мутагенной

активности ксенобиотиков. Химический канцерогенез. Краткая характеристика канцерогенов. Классификации канцерогенов. Стадии химического канцерогенеза. Токсическое влияние на репродуктивную функцию. Тератогенез.

3.2. Избирательная токсичность. Раздражающее действие. Краткая характеристика химических и физико-химических свойств токсикантов. Патогенез токсического эффекта. Основные проявления раздражающего действия. Дерматотоксичность. Пульмонотоксичность. Гематотоксичность. Нейротоксичность. Гепатотоксичность. Нефротоксичность.

Раздел 4. Основы экотоксикологии

Основы экотоксикологии. Ксенобиотический профиль среды. Экотоксикокинетика. Формирование ксенобиотического профиля. Источники поступления поллютантов в среду. Персистирование. Трансформация. Характеристика некоторых экотоксикантов.

5. СООТВЕТСТВИЕ СОДЕРЖАНИЯ ТРЕБОВАНИЙ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

№	В результате освоения дисциплины студент должен:	Раздел 1	Раздел 2	Раздел 3	Раздел 4
	Знать:				
1	– Современные научные достижения и перспективные направления работ в области химической токсикологии;	+		+	+
2	– Современные физико-химические, химические, фотохимические, кинетические и термодинамические представления о токсических свойствах биологически активных веществ;	+	+	+	+
3	– Основные типы и предпосылки развития токсических процессов, а также основы их патохимической и патофизиологической стадии;	+	+	+	
4	– Основные пути формирования ксенобиотического профиля среды, источники поступления в среду ксенобиотиков и механизмы их возможного накопления и деградации.				+
	Уметь:				
5	– Проводить анализ научной литературы в области современных исследований в области токсикологической химии;	+	+	+	+
6	– Формулировать требования к работе с различными группами токсикантов;	+	+	+	+
7	– Формулировать возможные механизмы поражения новыми синтетическими биологически активными веществами;	+	+	+	+
8	– Применять теоретические знания по химической токсикологии для решения исследовательских и прикладных задач, в том числе в междисциплинарных областях.			+	+
	Владеть:				
9	– Методами работы с научной, справочной литературой и электронно-библиотечными ресурсами по теоретическим и прикладным основам токсикологической химии и токсикологических исследований;	+	+	+	+
10	– Методологическими подходами, особенностями выявления взаимосвязей структуры и токсических свойств БАВ, обеспечивающих обоснованное принятие решений при разработке новых веществ с потенциальным биологически активным действием;		+	+	+
11	– Методами критического анализа и оценки современных научных достижений в области токсикологической химии, генерирования новых идей при решении исследовательских и практических задач в данной области;	+	+	+	+

12	– Способностью и готовностью к разработке новых методов исследования и их применению в самостоятельной научно-исследовательской деятельности в области химической токсикологии с учетом правил соблюдения авторских прав.				+
В результате освоения дисциплины студент должен приобрести следующие <i>профессиональные компетенции и индикаторы их достижения:</i>					
	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК			
13	ПК-2. Способен к поиску, обработке, анализу и систематизации научно-технической информации по теме исследования, выбору методик и средств решения задачи	ПК-2.1. Знает алгоритм поиска, оценки и анализа научно-технической информации;	+	+	+
		ПК-2.2. Умеет обобщать и систематизировать научно-техническую информацию;	+	+	+
		ПК-2.3. Владеет навыками соотнесения результатов собственной научной работы с отечественным и зарубежным опытом по тематике исследования.	+	+	+
14	ПК-4 Способен проводить поисковые исследования инновационных технологических процессов в области биологически активных веществ	ПК-4.2 Умеет производить поисковые работы для разработки новых методов получения и анализа биологически активных веществ.	+	+	+
15	ПК-5 Способен осуществлять самостоятельные научные исследования в области химии и технологии биологически активных веществ	ПК-5.1. Знает методы получения, особенности производства, свойства и механизмы действия биологически активных веществ различных классов;		+	+
		ПК-5.2. Знает теоретические основы функционирования живых организмов в норме и при патологии, необходимые для осуществления научных исследований по химии биологически активных веществ;	+	+	+
		ПК-5.3. Умеет использовать теоретические знания по химии и технологии биологически активных веществ для решения конкретных задач научно-исследовательской деятельности.		+	+

6. ПРАКТИЧЕСКИЕ И ЛАБОРАТОРНЫЕ ЗАНЯТИЯ

6.1. Практические занятия

Примерные темы практических занятий по дисциплине.

№ п/п	№ раздела дисциплины	Темы практических занятий	Часы
1	1	Взаимодействие ксенобиотиков с биосистемами: аспекты токсичности. Основные группы ксенобиотиков и токсикантов	2
2	2	Влияние структурных особенностей молекулы на токсичность. Взаимодействие ксенобиотиков с различными типами рецепторов	1
3		Нарушение основных биохимических процессов в клетке как основа цитотоксичности	1
4		Типы и механизмы химических превращений ксенобиотиков в процессе метаболизма	1
5		Особенности биосистем и их влияние на чувствительность к ксенобиотикам	1
6	3	Иммунотоксичность: типы иммунотоксических процессов. Химический мутагенез. Химический канцерогенез. Тератогенез и токсическое влияние на репродуктивную функцию	3
7		Раздражающее действие: лагриматоры и стерниты. Дерматотоксичность и фотосенсибилизация. Пульмонотоксичность и пульмонотоксиканты	2
8		Гематотоксичность. Гепатотоксичность. Нефротоксичность. Нейротоксичность	4
9	4	Механизмы формирования ксенобиотического профиля среды. Рассмотрение основных источников поступления поллютантов в среду. Явления, наблюдаемые при поступлении ксенобиотиков в среду	2

7. САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА

Самостоятельная работа проводится с целью углубления знаний по дисциплине и предусматривает:

- ознакомление и проработку рекомендованной литературы, работу с электронно-библиотечными системами, включая переводы публикаций из научных журналов, цитируемых в базах Scopus, Web of Science, Chemical Abstracts, РИНЦ;
- регулярную проработку пройденного на лекциях и практических занятиях учебного материала и подготовку к выполнению контрольных работ по разделам дисциплины;
- ознакомление и проработку рекомендованной литературы, и работу с электронно-библиотечными системами, включая переводы публикаций из научных журналов, цитируемых в базах Scopus, Web of Science, Chemical Abstracts, РИНЦ;
- подготовку реферативно-аналитической работы по тематике курса на основе проработки рекомендованной литературы и работы с электронно-библиотечными системами;

- посещение отраслевых выставок, семинаров, конференций различного уровня;
- участие в семинарах РХТУ им. И. Менделеева по тематике дисциплины;
- подготовку к сдаче зачета по дисциплине.

Планирование времени на самостоятельную работу, необходимого на изучение дисциплины, студентам лучше всего осуществлять на весь период изучения, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала. Материал, законспектированный на лекциях, необходимо регулярно дополнять сведениями из литературных источников, представленных в рабочей программе. При работе с указанными источниками рекомендуется составлять краткий конспект материала, с обязательным фиксированием библиографических данных источника.

8. ПРИМЕРЫ ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ КОНТРОЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Совокупная оценка по дисциплине складывается из оценок за выполнение контрольных работ (максимальная оценка 40 баллов), реферата (максимальная оценка 20 баллов) и итогового контроля в форме зачета с оценкой (максимальная оценка 40 баллов).

8.1. Примерная тематика реферативно-аналитической работы.

Примерный перечень тем рефератов:

1. Избирательная токсичность: определение понятия и история установления корреляции «структура – активность» и «свойство – активность». Рецепторы и лиганды, факторы избирательности.
2. Стадия распределения ксенобиотиков в организме. Различия в проницаемости мембран, механизмы распределения и накопления. Метаболические превращения веществ и их роль и возможности в модуляции проявлений БА и распределения.
3. Биохимические различия организмов, их сравнительная биохимия. Различия биохимических процессов про- и эукариотических организмов как основа избирательности действия токсикантов.
4. Различия в клеточной архитектуре как основа избирательности действия токсикантов. Особенности клеточного строения: клеточная стенка, внутриклеточная архитектура (плазматическая мембрана, ядро, митохондрии, рибосомы, ЭПР). Цитологические аспекты противоопухолевой и иммунотерапии.
5. Химиотерапия: история и принципы. Вклад П. Эрлиха. Химиотерапевтический индекс. Группы химиотерапевтических средств. Проблемы резистентности. Современные подходы к химиотерапии.
6. Взаимосвязь фармако- и токсикодинамики и химиотерапии. Механизмы действия агонистов и антагонистов на рецепторы. Основные гипотезы о механизме действия лекарственных веществ. Современные представления.
7. Концепция антиметаболитов как аналогов коферментов и субстратов ферментов, обладающих антагонистическим действием. История изучения. Ингибиторы переходного состояния, последовательное блокирование. Аналоги метаболитов, образующие ковалентные связи.
8. Физико-химические особенности токсиканта. Ионизация, кислотно-основные равновесия. Различия в ионизации, обеспечивающие избирательность. Ионизация рецепторов.
9. Стерические факторы и их роль в избирательной токсичности. Оптические, геометрические изомеры, конформеры. Рецепторы.

10. Роль ковалентной связи в механизмах проявления токсичности. Антибиотики, ФОС, алкилаторы. Летальный синтез.
11. Химия поверхностных явлений и модификация мембран ПАВ. Поверхностные явления и действие лекарств. Диуретики, гликозиды, сапонины, ионофоры. Защита и повреждение мембран БА агентами.
12. БА, не связанная со структурой. Общие биологические депрессанты (снотворные, общие анестетики, летучие инсектициды). Нарушения митоза: агенты и последствия.
13. Биоактивация ксенобиотиков и некоторых систем до реакционноспособных и токсикоактивных метаболитов (бензпирен, ацетаминофен, кумарины, клозапин). Гиполипидемические лекарственные препараты. Семейство протеаз – калпаинов и заболевания людей.
14. Механизмы фототоксичности и избирательность. Фотодинамическая терапия.
15. Индукция окислительного стресса. Хиноны и их роль. Последствия окислительного стресса. Окислительное повреждение ДНК, белков, липидов. Регуляция окисления жирных кислот.
16. Гепатотоксичность. Характеристика гепатотоксинов. Условия воздействия гепатотоксинов. Факторы, влияющие на гепатотоксичность. Высокоактивные гепатоканцерогены грибов.
17. Иммунотоксичность. Характеристика иммунной системы. Действие токсикантов. Понятие иммунотоксичности. Иммуносупрессия, реакции гиперчувствительности. Аутоиммунные процессы.
18. Химический канцерогенез. Характеристика канцерогенов, классификация. Стадии канцерогенеза и механизмы действия. Выявление канцерогенной активности веществ. Оценка риска химического канцерогенеза.
19. Гематотоксичность. Нарушения гемопоэза. Характеристика токсикантов. Изменение числа форменных элементов крови. Гемолитические анемии. Аплазия костного мозга, лейкемии. Характеристика наиболее известных токсикантов, вызывающих патологии крови и механизмы их действия.
20. Нейротоксичность. Причины уязвимости нервной системы для токсикантов. Характеристика нейротоксикантов и нейротоксических процессов. Проявления нейротоксических процессов. Конвульсанты, седативно-гипнотивные средства, наркотики, психодислептики, эйфориогены, галлюциногены, делириогены. Механизмы действия.
21. Экоотоксикология. Формирование ксенобиотического профиля среды. Источники поступления поллютантов в среду. Персистирование, биотрансформация, аккумуляция, биомагнификация. Экоотоксикодинамика, экоотоксикометрия. Экоотоксиканты, опасные для человека.

8.2. Примеры контрольных вопросов для текущего контроля освоения дисциплины

Для текущего контроля предусмотрено 4 контрольных работы (по одной контрольной работе для каждого раздела). Максимальная оценка за контрольные работы составляет по 10 баллов за каждую.

Раздел 1. Примеры вопросов к контрольной работе № 1. Максимальная оценка – 10 баллов. Контрольная работа содержит 2 вопроса, по 5 баллов за вопрос.

Вопрос 1.1.

1. Основные понятия токсикологии. Предмет курса. Токсичность, токсический процесс. Структура токсикологии.
2. Токсический процесс: основные характеристики.
3. Токсичность, токсический процесс. Формы проявления токсического процесса на разных уровнях организации жизни.

4. Токсические процессы, развивающиеся по пороговому и беспороговому принципу. Интоксикации: типы и локализация.
5. Избирательная токсичность действия токсикантов. Интенсивность воздействия токсикантов. Аллобиоз.
6. Цели и задачи токсикологии, решаемые в токсикометрии, токсикокинетике и токсикодинамике.
7. Классификации токсикантов.
8. Характеристика животных ядов: примеры и механизмы действия
9. Характеристика микотоксинов.
10. Характеристика бактериальных токсинов: примеры и механизмы действия.
11. Характеристика растительных ядов: алкалоиды и гликозиды. Механизмы действия.
12. Характеристика ядов неорганической природы (примеры, механизмы действия).
13. Характеристика органических соединений естественного происхождения. ПАУ.
14. Характеристика органических соединений естественного происхождения. ПАУ и синтетических токсикантов: примеры и механизм действия

Вопрос 1.2.

1. Влияние химических свойств токсиканта на токсичность.
2. Роль нековалентных взаимодействий в развитии токсического процесса.
3. Роль водородных связей в развитии токсического процесса.
4. Влияние размеров молекулы на токсичность.
5. Влияние геометрии молекулы на токсичность.
6. Влияние структурной изомерии на токсичность. Основные закономерности.
7. Влияние растворимости в липидах на токсичность.
8. Влияние растворимости в водных средах на токсичность
9. Роль координационных, ион-дипольных и ион-ионных связей в развитии токсического процесса.
10. Роль сил Ван-дер-Ваальса и гидрофобных взаимодействий в развитии токсического процесса.
11. Роль координационных связей в развитии токсического процесса.
12. Влияние кислотно-основной природы токсиканта на токсичность
13. Роль ковалентной связи в развитии токсического процесса.
14. Влияние растворимости в воде на токсичность.
15. Роль ионной связи в развитии токсического процесса
16. Роль ион-дипольных и ион-ионных связей в развитии токсического процесса.

Раздел 2. Примеры вопросов к контрольной работе № 2. Максимальная оценка – 10 баллов. Контрольная работа содержит 2 вопроса, по 5 баллов за вопрос.

Вопрос 2.1.

1. Механизмы токсического действия. Определение понятия "рецептор" в токсикологии. Типы рецепторов
2. Механизмы токсического действия. Взаимодействие токсикантов с рецепторами разных типов.
 1. Механизмы токсического действия. Действие токсиканта на элементы межклеточного пространства.
 2. Механизмы токсического действия. Взаимодействие токсикантов с липидами.
 3. Повреждение процессов синтеза белка и клеточного деления.
 4. Механизмы действия ингибиторов синтеза нуклеиновых кислот и белков. Биологические последствия действия токсикантов на нуклеиновый обмен и синтез белка.

3. Действие токсикантов на биологические механизмы регуляции клеточной активности: прямое межклеточное взаимодействие.
4. Механизмы токсического действия. Действие токсикантов на структурные элементы клеток.
5. Механизмы токсического действия. Механизмы изменения каталитической активности ферментов в условиях действия токсикантов.
6. Механизмы токсического действия. Взаимодействие токсикантов с нуклеиновыми кислотами.
7. Изучение локализации рецепторов в биообъекте. Понятие полирецепторного профиля связывания токсиканта.
8. Нарушение процессов биоэнергетики в клетке. Механизмы действия токсикантов на биоэнергетические процессы.
9. Активация свободно-радикальных процессов в клетке. Реализация повреждающего действия ксенобиотиков на клетку путем активации свободно-радикальных процессов.
10. Токсические эффекты свободных радикалов. Механизмы непосредственного действия токсикантов на биологические мембраны.
11. Активация ферментов. Окислительно-восстановительный цикл трансформации ксенобиотиков.
12. Особенности Ca^{2+} -регуляции внутриклеточных процессов. Нарушение гомеостаза внутриклеточного кальция.
13. Ca^{2+} -зависимые механизмы повреждения цитоскелета клеток.

Вопрос 2.2.

1. Действие токсикантов на биологические механизмы регуляции клеточной активности: механизмы гуморальной регуляции.
2. Действие токсикантов на биологические механизмы регуляции клеточной активности: механизмы нервной регуляции
3. Действие токсикантов на биологические механизмы регуляции клеточной активности.
4. Действие токсикантов на биологические механизмы регуляции клеточной активности: особенности повреждения механизмов регуляции клеточной активности.
5. Действие токсикантов на биологические механизмы регуляции клеточной активности: особенности токсического повреждения механизмов регуляции клеточной активности.
6. Изменение числа рецепторов, вызываемое действием ксенобиотиков.
7. Действие токсикантов на биологические механизмы регуляции клеточной активности. Десенсибилизация рецепторов.
8. Концепция I и II фазы метаболизма ксенобиотиков. Следствия химической модификации молекулы ксенобиотика.
9. Концепция I и II фазы метаболизма ксенобиотиков. Локализация процессов биотрансформации.
10. Первая фаза метаболизма ксенобиотиков: локализация, ферменты, типы ферментатических превращений.
11. Цитохром P-450-зависимая монооксигеназная система. Реакции, катализируемые цитохромом P-450.
12. Флавиносодержащие монооксигеназы (ФМО). Реакции, катализируемые ФМО. Пероксидазы, дегидрогеназы, флавопротеинредуктазы, эпоксигидролазы.
13. Вторая фаза метаболизма. Характеристика основных реакций конъюгации ксенобиотиков.
14. Вторая фаза метаболизма. Ацетилирование. Конъюгация с глюкуроновой кислотой. Взаимодействие ксенобиотика с глутатионом

15. Активные метаболиты и их роль в инициации токсического процесса. Модели механизмов, связывающих метаболизм ксенобиотиков и процессы формирования повреждения органов и систем.

16. Факторы, влияющие на токсичность. Генетически обусловленные особенности реакций организма на действие токсикантов. Генетические особенности личности.

17. Факторы, влияющие на токсичность. Различия, связанные с полом и возрастом.

18. Явления, наблюдаемые при длительном воздействии токсикантов: основные формы и их характеристика.

19. Толерантность. Виды толерантности. Основные механизмы толерантности.

20. Тахифилаксия. Определение, характеристика явления, возможные механизмы формирования.

21. Хроническая форма толерантности: причины и возможные последствия. Биохимические особенности организма в случае хронической формы толерантности.

22. Виды толерантности, механизмы формирования. Биологическое значение толерантности.

23. Явления, наблюдаемые при длительном воздействии токсикантов: толерантность, химическая зависимость. Сходства и различия.

Раздел 3. Примеры вопросов к контрольной работе № 3. Максимальная оценка – 10 баллов. Контрольная работа содержит 2 вопроса, по 5 баллов за вопрос.

Вопрос 3.1.

1. Специальные формы токсического процесса. Виды, примеры.
2. Специальные формы токсического процесса. Иммунотоксичность.
3. Особенности функционирования иммунной системы и типы иммунотоксических процессов.
4. Особенности иммунной системы.
5. Химический мутагенез: мутагены и виды мутаций.
6. Тератогенез: определение и закономерности.
7. Механизмы действия тератогенов.
8. Тератогенез. Примеры тератогенов.
9. Особенности проявления специальных форм токсического процесса.
10. Специальные формы токсического процесса и избирательная токсичность: сравнительная характеристика.

Вопрос 3.2.

1. Избирательная токсичность: понятие, основные типы процессов.
2. Лакриматоры и стерниты: механизмы действия, примеры.
3. Дерматотоксичность: химические дерматиты, фотосенсибилизация. Примеры токсикантов.
4. Пульмонотоксичность. Формы патологии дыхательной системы химической этиологии. Примеры пульмонотоксикантов.
5. Нефротоксичность. Механизмы нефротоксического действия ксенобиотиков. Примеры нефротоксикантов.
6. Нейротоксичность. Механизмы нейротоксического действия ксенобиотиков.
7. Примеры высокоактивных нейротоксикантов. Механизмы действия.
8. Гематотоксичность. Механизмы гематотоксического действия ксенобиотиков.
9. Примеры гематотоксикантов. Механизмы гематотоксического действия ксенобиотиков
Гепатотоксичность. Механизмы гепатотоксического действия ксенобиотиков. Примеры гепатотоксикантов.

Раздел 4. Примеры вопросов к контрольной работе № 4. Максимальная оценка – 10 баллов. Контрольная работа содержит 1 вопрос на 10 баллов.

1. Основы экотоксикологии. Основные определения.
2. Ксенобиотический профиль среды.
3. Экотоксикокинетика и экотоксикодинамика.
4. Основные определения и назначения дисциплин.
5. Процессы формирования ксенобиотического профиля среды.
6. Источники поступления токсикантов в среду.
7. Хозяйственная деятельность человека.
8. Явления, наблюдаемые при длительном поступлении ксенобиотиков в среду. Персистирование ксенобиотиков.
9. Биотрансформация ксенобиотиков.
10. Характеристика основных экополлютантов.

**8.3. Вопросы для итогового контроля освоения дисциплины
(2 семестр – зачет с оценкой)**

Билет для зачета с оценкой включает контрольные вопросы по всем разделам рабочей программы дисциплины и содержит 4 вопроса по 10 баллов.

1. Основные понятия токсикологии. Предмет курса. Токсичность, токсический процесс. Структура токсикологии. Токсический процесс: основные характеристики.
2. Токсичность, токсический процесс. Формы проявления токсического процесса на разных уровнях организации жизни.
3. Токсические процессы, развивающиеся по пороговому и беспороговому принципу. Интоксикации: типы и локализация.
4. Избирательная токсичность действия токсикантов. Интенсивность воздействия токсикантов. Аллобиоз.
5. Цели и задачи токсикологии, решаемые в токсикометрии, токсикокинетике и токсикодинамике.
6. Классификации токсикантов. Характеристика животных ядов: примеры и механизмы действия. Характеристика микотоксинов.
7. Характеристика бактериальных токсинов: примеры и механизмы действия. Характеристика растительных ядов: алкалоиды и гликозиды. Механизмы действия.
8. Характеристика ядов неорганической природы (примеры, механизмы действия). Характеристика органических соединений естественного происхождения. ПАУ и синтетических токсикантов: примеры и механизм действия
9. Влияние химических свойств токсиканта на токсичность.
10. Роль нековалентных взаимодействий в развитии токсического процесса. Роль координационных, ион-дипольных и ион-ионных связей в развитии токсического процесса. Роль сил Ван-дер-Ваальса и гидрофобных взаимодействий в развитии токсического процесса. Роль водородных связей в развитии токсического процесса.
11. Влияние размеров и геометрии молекулы на токсичность. Влияние структурной изомерии на токсичность. Основные закономерности.
12. Влияние растворимости в воде на токсичность. Влияние растворимости в липидах на токсичность. Влияние кислотно-основной природы токсиканта на токсичность
13. Роль ковалентной связи в развитии токсического процесса. Роль ионной связи в развитии токсического процесса.
14. Механизмы токсического действия. Определение понятия "рецептор" в токсикологии. Типы рецепторов. Взаимодействие токсикантов с рецепторами разных типов.
15. Изучение локализации рецепторов в биообъекте. Понятие полирецепторного профиля связывания токсиканта

16. Механизмы токсического действия. Действие токсиканта на элементы межклеточного пространства. Механизмы токсического действия. Взаимодействие токсикантов с липидами.
17. Повреждение процессов синтеза белка и клеточного деления. Механизмы действия ингибиторов синтеза нуклеиновых кислот и белков. Биологические последствия действия токсикантов на нуклеиновый обмен и синтез белка.
18. Действие токсикантов на биологические механизмы регуляции клеточной активности: прямое межклеточное взаимодействие. Механизмы токсического действия. Действие токсикантов на структурные элементы клеток.
19. Механизмы токсического действия. Механизмы изменения каталитической активности ферментов в условиях действия токсикантов.
20. Механизмы токсического действия. Взаимодействие токсикантов с нуклеиновыми кислотами.
21. Нарушение процессов биоэнергетики в клетке. Механизмы действия токсикантов на биоэнергетические процессы.
22. Активация свободно-радикальных процессов в клетке. Реализация повреждающего действия ксенобиотиков на клетку путем активации свободно-радикальных процессов. Токсические эффекты свободных радикалов. Механизмы непосредственного действия токсикантов на биологические мембраны.
23. Активация ферментов. Окислительно-восстановительный цикл трансформации ксенобиотиков.
24. Особенности Ca^{2+} -регуляции внутриклеточных процессов. Нарушение гомеостаза внутриклеточного кальция. Ca^{2+} -зависимые механизмы повреждения цитоскелета клеток.
25. Действие токсикантов на биологические механизмы регуляции клеточной активности: механизмы гуморальной регуляции, механизмы нервной регуляции, механизмы регуляции клеточной активности.
26. Действие токсикантов на биологические механизмы регуляции клеточной активности: особенности повреждения механизмов регуляции клеточной активности.
27. Изменение числа рецепторов, вызываемое действием ксенобиотиков. Действие токсикантов на биологические механизмы регуляции клеточной активности. Десенсибилизация рецепторов.
28. Концепция I и II фазы метаболизма ксенобиотиков. Следствия химической модификации молекулы ксенобиотика. Локализация процессов биотрансформации.
29. Первая фаза метаболизма ксенобиотиков: локализация, ферменты, типы ферментатических превращений. Цитохром P-450-зависимая монооксигеназная система. Реакции, катализируемые цитохромом P-450.
30. Флавиносодержащие монооксигеназы (ФМО). Реакции, катализируемые ФМО. Пероксидазы, дегидрогеназы, флавопротеинредуктазы, эпоксигидролазы.
31. Вторая фаза метаболизма. Характеристика основных реакций конъюгации ксенобиотиков. Ацетилирование. Конъюгация с глюкуроновой кислотой. Взаимодействие ксенобиотика с глутатионом
32. Активные метаболиты и их роль в инициации токсического процесса. Модели механизмов, связывающих метаболизм ксенобиотиков и процессы формирования повреждения органов и систем.
33. Факторы, влияющие на токсичность. Генетически обусловленные особенности реакций организма на действие токсикантов. Генетические особенности личности. Факторы, влияющие на токсичность. Различия, связанные с полом и возрастом.
34. Явления, наблюдаемые при длительном воздействии токсикантов: основные формы и их характеристика.

35. Толерантность. Виды толерантности. Основные механизмы толерантности. Тахифилаксия. Определение, характеристика явления, возможные механизмы формирования.
36. Хроническая форма толерантности: причины и возможные последствия. Биохимические особенности организма в случае хронической формы толерантности.
37. Виды толерантности, механизмы формирования. Биологическое значение толерантности. Явления, наблюдаемые при длительном воздействии токсикантов: толерантность, химическая зависимость. Сходства и различия.
38. Специальные формы токсического процесса. Виды, примеры.
39. Иммунотоксичность. Особенности функционирования иммунной системы и типы иммунотоксических процессов.
40. Особенности иммунной системы.
41. Химический мутагенез: мутагены и виды мутаций.
42. Избирательная токсичность: понятие, основные типы процессов.
43. Лакриматоры и стерниты: механизмы действия, примеры.
44. Дерматотоксичность: химические дерматиты, фотосенсибилизация. Примеры токсикантов.
45. Пульмонотоксичность. Формы патологии дыхательной системы химической этиологии. Примеры пульмонотоксикантов.
46. Нефротоксичность. Механизмы нефротоксического действия ксенобиотиков. Примеры нефротоксикантов.
47. Тератогенез: определение и закономерности.
48. Механизмы действия тератогенов.
49. Тератогенез. Примеры тератогенов.
50. Основы экотоксикологии. Основные определения. Ксенобиотический профиль среды.
51. Экотоксикокинетика и экотоксикодинамика. Основные определения и назначения дисциплин.
52. Процессы формирования ксенобиотического профиля среды.
53. Источники поступления токсикантов в среду. Хозяйственная деятельность человека. Явления, наблюдаемые при длительном поступлении ксенобиотиков в среду.
54. Персистирование ксенобиотиков. Биотрансформация ксенобиотиков. Характеристика основных экополлютантов.

Фонд оценочных средств приведен в виде отдельного документа, являющегося неотъемлемой частью основной образовательной программы.

8.4. Структура и примеры билетов для зачета с оценкой

Зачет с оценкой по дисциплине «Токсикологическая химия» проводится во 2-м семестре и включает контрольные вопросы по всем разделам рабочей программы дисциплины. Билет для зачета с оценкой состоит из 4-х вопросов, относящихся ко всем разделам дисциплины.

Пример билета для зачета с оценкой:

«Утверждаю» Зав. каф. ХТБМП _____ М.С. Ощепков «__» _____ 20__ г.	Министерство науки и высшего образования РФ
	Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева
	Кафедра химии и технологии биомедицинских препаратов
	18.04.01 Химическая технология Магистерская программа – «Химия и технология биологически активных веществ»

	Токсикологическая химия
	Билет № 1
1. Основные понятия токсикологии. Предмет курса. Токсичность, токсический процесс. Структура токсикологии. 2. Концепция I и II фазы метаболизма ксенобиотиков. Следствия химической модификации молекулы ксенобиотика. 3. Явления, наблюдаемые при длительном воздействии токсикантов: основные формы и их характеристика. 4. Источники поступления токсикантов в среду. Хозяйственная деятельность человека. Явления, наблюдаемые при длительном поступлении ксенобиотиков в среду.	

9. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

9.1. Рекомендуемая литература

А. Основная литература

1. Коваленко Л. В. Психоактивные соединения. Химия и биологическая активность. - М.: РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2012. - 123 с.
2. Коваленко Л.В., Ощепков М.С., Соловьева И.Н. Химия и биологическая активность фосфорорганических соединений. - М.: РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2015. - 156 с.
3. Коваленко, Л. В. Биохимические основы химии биологически активных веществ - М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2014. - 229 с.
4. Эллиот, В. Биохимия и молекулярная биология. М.: МАИК "Наука/Интерпериодика", 2002. – 237 с. (Базовый учебник).
5. Соловьева И.Н., Ткаченко С.В., Коваленко Л.В., Дегтярёв В.П. Основы нейрoхимии в норме и при патологии: учебное пособие. – М. Издательство РХТУ им. Д.И. Менделеева. – 2019. – 156 с.

Б. Дополнительная литература

1. Куценко С.А. Основы токсикологии. М.: Фолиант, 2004. – 395 с.
2. Альберт А. Избирательная токсичность: Физико-химические основы терапии: В 2-х т. (пер. с англ.) Москва: Медицина. – 1989.
3. Токсикологическая химия. Метаболизм и анализ токсикантов: учебное пособие под ред. Н.И. Калетиной. – М: ГЭОТАР- Медиа, 2008. – 1016 с.
4. Вергейчик Т.Х. Токсикологическая химия - М.: МЕДпресс-информ, 2009 - 400 с.

9.2. Рекомендуемые источники научно-технической информации

Научные журналы:

- Toxicology Research ISSN 2214-7500
- Toxicology and Applied Pharmacology ISSN 0041-008X
- Toxicological Sciences ISSN 1096-6080
- The Journal of Toxicological Sciences ISSN 0388-1350.
- Fundamental and Applied Toxicology ISSN 0272-0590
- Toxicological Sciences ISSN 1096-6080

10. ПЕРЕЧЕНЬ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ В ОБРАЗОВАТЕЛЬНОМ ПРОЦЕССЕ

Информационную поддержку изучения дисциплины осуществляет Информационно-библиотечный центр (ИБЦ) РХТУ им. Д.И. Менделеева, который обеспечивает обучающихся основной учебной, учебно-методической и научной литературой, необходимой для организации образовательного процесса по дисциплине. Общий объем многоотраслевого фонда ИБЦ на 01.01.2024 г. составляет 1 559 436 экз.

Фонд ИБЦ располагает учебной, учебно-методической и научно-технической литературой в форме печатных и электронных изданий, а также включает официальные, справочно-библиографические, специализированные отечественные и зарубежные периодические и информационные издания. ИБЦ обеспечивает доступ к профессиональным базам данных, информационным, справочным и поисковым системам.

Каждый обучающийся обеспечен свободным доступом из любой точки, в которой имеется доступ к сети Интернет и к электронно-библиотечной системе (ЭБС) Университета, которая содержит различные издания по основным изучаемым дисциплинам и сформирована по согласованию с правообладателями учебной и учебно-методической литературы.

Для более полного и оперативного справочно-библиографического и информационного обслуживания в ИБЦ реализована технология Электронной доставки документов.

Полный перечень электронных информационных ресурсов, используемых в процессе обучения, представлен в основной образовательной программе.

4. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

В соответствии с учебным планом занятия по дисциплине «Токсикологическая химия» проводятся в форме лекций, практических занятий и самостоятельной работы обучающегося.

11.1. Оборудование, необходимое в образовательном процессе:

Лекционная учебная аудитория, оборудованная электронными средствами демонстрации (компьютер со средствами звуковоспроизведения, проектор, экран) и учебной мебелью.

11.2. Учебно-наглядные пособия:

Иллюстрации к разделам лекционного курса и практическим занятиям; графики и таблицы, иллюстрирующие лекционный материал.

11.3. Компьютеры, информационно-телекоммуникационные сети, аппаратно-программные и аудиовизуальные средства:

Персональные компьютеры в аудитории для самостоятельной подготовки обучающихся, укомплектованные принтерами и программными средствами; проекторы и экраны; цифровые камеры; копировальные аппараты; локальная сеть с выходом в Интернет.

11.4. Печатные и электронные образовательные и информационные ресурсы:

Электронные образовательные ресурсы: электронные презентации к разделам лекционного курса; учебно-методические разработки в электронном виде.

11.5. Перечень лицензионного программного обеспечения:

№ п/п	Наименование программного продукта	Реквизиты договора поставки	Примечание	Срок окончания действия лицензии
1.	Micosoft Office Standard 2013	Контракт № 62-64ЭА/2013 от 02.12.2013	Лицензия на ПО, принимающее участие в образовательных процессах.	Бессрочная
2.	Microsoft Office Professional Plus 2019 В составе: Word, Excel, Power Point, Outlook, OneNote, Access, Publisher, InfoPath	Контракт № 28-35ЭА/2020 от 26.05.2020	Лицензия на ПО, принимающее участие в образовательных процессах.	12 месяцев (ежегодное продление подписки с правом перехода на обновлённую версию продукта)
3.	Kaspersky Endpoint Security для бизнеса – Стандартный Russian Edition.	Контракт № 90-133ЭА/2021 от 07.09.2021	Лицензия на ПО, не принимающее прямого участия в образовательных процессах (инфраструктурное/вспомогательное ПО)	12 месяцев (ежегодное продление подписки с правом перехода на обновлённую версию продукта)
4.	«Антиплагиат.ВУЗ 5.0»	Контракт от 08.05.2024 №34-523К/2024	Лимит проверок 10 000	19.05.2025

12. ТРЕБОВАНИЯ К ОЦЕНКЕ КАЧЕСТВА ОСВОЕНИЯ ПРОГРАММЫ

Наименование разделов	Основные показатели оценки	Формы и методы контроля и оценки
Раздел №1. Основные положения токсикологии: биосистемы – мишени действия токсикантов	<i>Знает:</i> – Современные научные достижения и перспективные направления работ в области химической токсикологии; – Современные физико-химические, химические, фотохимические, кинетические и термодинамические представления о токсических свойствах биологически активных веществ; – Основные типы и предпосылки развития токсических процессов, а также основы их патохимической и патофизиологической стадии; <i>Умеет:</i> – Проводить анализ научной литературы в области современных исследований в области токсикологической химии; – Формулировать требования к работе с различными группами токсикантов; – Формулировать возможные	Оценка за контрольную работу №1 Оценка за реферат Оценка за зачет

	механизмы поражения новыми синтетическими биологически активными веществами; <i>Владеет:</i> – Методами работы с научной, справочной литературой и электронно-библиотечными ресурсами по теоретическим и прикладным основам токсикологической химии и токсикологических исследований; – Методами критического анализа и оценки современных научных достижений в области токсикологической химии, генерирования новых идей при решении исследовательских и практических задач в данной области; – Способностью и готовностью к разработке новых методов исследования и их применению в самостоятельной научно-исследовательской деятельности в области химической токсикологии с учетом правил соблюдения авторских прав.	
Раздел №2. Свойства токсиканта, определяющие его токсичность, токсикокинетика и токсикодинамика	<i>Знает:</i> – Современные физико-химические, химические, фотохимические, кинетические и термодинамические представления о токсических свойствах биологически активных веществ; – Основные типы и предпосылки развития токсических процессов, а также основы их патохимической и патофизиологической стадии; <i>Умеет:</i> – Проводить анализ научной литературы в области современных исследований в области токсикологической химии; – Формулировать требования к работе с различными группами токсикантов; – Формулировать возможные механизмы поражения новыми синтетическими биологически активными веществами; <i>Владеет:</i> – Методами работы с научной, справочной литературой и электронно-библиотечными ресурсами по теоретическим и прикладным основам	Оценка за контрольную работу №2 Оценка за реферат Оценка за зачет

	токсикологической химии и токсикологических исследований; – Методологическими подходами, особенностями выявления взаимосвязей структуры и токсических свойств БАВ, обеспечивающих обоснованное принятие решений при разработке новых веществ с потенциальным биологически активным действием; – Методами критического анализа и оценки современных научных достижений в области токсикологической химии, генерирования новых идей при решении исследовательских и практических задач в данной области; – Способностью и готовностью к разработке новых методов исследования и их применению в самостоятельной научно-исследовательской деятельности в области химической токсикологии с учетом правил соблюдения авторских прав.	
Раздел №3. Избирательная токсичность и специальные виды токсического действия	<i>Знает:</i> – Современные научные достижения и перспективные направления работ в области химической токсикологии; – Современные физико-химические, химические, фотохимические, кинетические и термодинамические представления о токсических свойствах биологически активных веществ; – Основные типы и предпосылки развития токсических процессов, а также основы их патохимической и патофизиологической стадии; <i>Умеет:</i> – Проводить анализ научной литературы в области современных исследований в области токсикологической химии; – Формулировать требования к работе с различными группами токсикантов; – Формулировать возможные механизмы поражения новыми синтетическими биологически активными веществами; – Применять теоретические знания по химической токсикологии для решения исследовательских и прикладных задач,	Оценка за контрольную работу №3 Оценка за реферат Оценка за зачет

	в том числе в междисциплинарных областях. <i>Владеет:</i> – Методами работы с научной, справочной литературой и электронно-библиотечными ресурсами по теоретическим и прикладным основам токсикологической химии и токсикологических исследований; – Методологическими подходами, особенностями выявления взаимосвязей структуры и токсических свойств БАВ, обеспечивающих обоснованное принятие решений при разработке новых веществ с потенциальным биологически активным действием; – Методами критического анализа и оценки современных научных достижений в области токсикологической химии, генерирования новых идей при решении исследовательских и практических задач в данной области; – Способностью и готовностью к разработке новых методов исследования и их применению в самостоятельной научно-исследовательской деятельности в области химической токсикологии с учетом правил соблюдения авторских прав.	
Раздел №4. Основы экотоксикологии	<i>Знает:</i> – Современные научные достижения и перспективные направления работ в области химической токсикологии; – Современные физико-химические, химические, фотохимические, кинетические и термодинамические представления о токсических свойствах биологически активных веществ; – Основные пути формирования ксенобиотического профиля среды, источники поступления в среду ксенобиотиков и механизмы их возможного накопления и деградации. <i>Умеет:</i> – Проводить анализ научной литературы в области современных исследований в области токсикологической химии; – Формулировать требования к работе с	Оценка за контрольную работу №4 Оценка за реферат Оценка за зачет

	различными группами токсикантов; – Формулировать возможные механизмы поражения новыми синтетическими биологически активными веществами; – Применять теоретические знания по химической токсикологии для решения исследовательских и прикладных задач, в том числе в междисциплинарных областях. <i>Владеет:</i> – Методами работы с научной, справочной литературой и электронно-библиотечными ресурсами по теоретическим и прикладным основам токсикологической химии и токсикологических исследований; – Методологическими подходами, особенностями выявления взаимосвязей структуры и токсических свойств БАВ, обеспечивающих обоснованное принятие решений при разработке новых веществ с потенциальным биологически активным действием; – Методами критического анализа и оценки современных научных достижений в области токсикологической химии, генерирования новых идей при решении исследовательских и практических задач в данной области; – Способностью и готовностью к разработке новых методов исследования и их применению в самостоятельной научно-исследовательской деятельности в области химической токсикологии с учетом правил соблюдения авторских прав.	

13. ОСОБЕННОСТИ ОРГАНИЗАЦИИ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО ПРОЦЕССА ДЛЯ ИНВАЛИДОВ И ЛИЦ С ОГРАНИЧЕННЫМИ ВОЗМОЖНОСТЯМИ ЗДОРОВЬЯ

Обучение инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья осуществляется в соответствии с:

- Порядком организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры (Приказ Министерства науки и высшего образования Российской Федерации от 06.04.2021 № 245);

- Положением о порядке организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования – программам

бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева», принятым решением Ученого совета РХТУ им. Д.И. Менделеева от 28.12.2022, протокол № 5;

– Методическими рекомендациями по организации образовательного процесса для обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья в образовательных организациях высшего образования, в том числе оснащенности образовательного процесса (утверждены заместителем Министра образования и науки РФ А.А. Климовым от 08.04.2014 № АК-44/05вн).

**Дополнения и изменения к рабочей программе дисциплины
«Токсикологическая химия»**

**основной образовательной программы
по направлению подготовки 18.04.01 Химическая технология,
магистерская программа – «Химия и технология биологически активных веществ»**

Форма обучения: **очная**

Номер изменения/ дополнения	Содержание дополнения/изменения	Основание внесения изменения/дополнения
1.		протокол заседания Ученого совета № _____ от «___» _____ 20__ г.
		протокол заседания Ученого совета № _____ от «___» _____ 20__ г.
		протокол заседания Ученого совета № _____ от «___» _____ 20__ г.
		протокол заседания Ученого совета № _____ от «___» _____ 20__ г.
		протокол заседания Ученого совета № _____ от «___» _____ 20__ г.

**Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Российский химико-технологический университет
имени Д.И. Менделеева»**

«УТВЕРЖДЕНО»
на заседании Ученого совета
РХТУ им. Д.И. Менделеева
протокол № 1 от «29» августа 2024 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
«Химия и биологическая активность элементоорганических соединений»

Направление подготовки 18.04.01 Химическая технология

Магистерская программа:
«Химия и технология биологически активных веществ»

Квалификация «магистр»

Москва 2024

Программа составлена на кафедре химии и технологии биомедицинских препаратов.
Авторы программы: д.х.н., проф. Коваленко Л.В., д.х.н., профессор Офицеров Е.Н.

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры Химии и технологии биомедицинских препаратов «16» апреля 2024 г., протокол №7.

1. ЦЕЛЬ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ

Программа составлена в соответствии с требованиями Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования – магистратура по направлению подготовки 18.04.01 Химическая технология (ФГОС ВО), рекомендациями Методической комиссии и накопленным опытом преподавания дисциплины кафедрой Химии и технологии биомедицинских препаратов РХТУ им. Д.И. Менделеева. Программа рассчитана на изучение дисциплины в течение одного семестра.

Дисциплина «Химия и биологическая активность элементоорганических соединений» относится к дисциплинам по выбору части дисциплин учебного плана, формируемой участниками образовательных отношений. Программа дисциплины предполагает, что обучающиеся имеют теоретическую и практическую подготовку в области неорганической и общей химии, органической химии и биохимии.

Цель дисциплины – повышение научно-технической и методологической компетенций магистранта, необходимых для решения профессиональных задач, связанных с проведением научно-исследовательской работы в области элементоорганических соединений.

Задачи дисциплины:

- формирование у обучающихся системных углубленных знаний в области органических соединений, в составе которых атомы углерода непосредственно связаны с атомами металлов и элементов с вакантными d- и f-орбиталями;

- формирование у обучающихся системных углубленных знаний в области биологической активности элементоорганических соединений.

Дисциплина «Химия и биологическая активность элементоорганических соединений» преподается в 2-м семестре. Контроль успеваемости студентов ведется по принятой в университете рейтинговой системе.

Рабочая программа дисциплины может быть реализована с применением электронных образовательных технологий и электронного обучения полностью или частично.

2. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Изучение дисциплины направлено на приобретение следующих **компетенций и индикаторов их достижения:**

Профессиональные компетенции и индикаторы их достижения:

Задача профессиональной деятельности	Объект или область знания	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК	Основание (профессиональный стандарт, анализ опыта) Обобщенные трудовые функции
Научно-исследовательский тип задач профессиональной деятельности				
Выполнение фундаментальных и прикладных работ поискового, теоретического и экспериментального характера с целью определения технических характеристик новой техники, а также комплекса работ по разработке технологической документации.	Химическое, химико-технологическое производство Сквозные виды профессиональной деятельности в промышленности (в сфере организации и проведения научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ в области химического и химико-технологического производства).	ПК-2. Способен к поиску, обработке, анализу и систематизации научно-технической информации по теме исследования, выбору методик и средств решения задачи	ПК-2.1. Знает алгоритм поиска, оценки и анализа научно-технической информации; ПК-2.2. Умеет обобщать и систематизировать научно-техническую информацию; ПК-2.3. Владеет навыками соотнесения результатов собственной научной работы с отечественным и зарубежным опытом по тематике исследования.	Профессиональный стандарт 40.011 «Специалист по научно-исследовательским и опытно-конструкторским разработкам», утвержденный приказом Министерства труда и социальной защиты Российской Федерации от 04.03.2014 № 121 н, Обобщенная трудовая функция С. Проведение научно-исследовательских и опытно-конструкторских разработок. С /01.6. Осуществление научного руководства проведением исследований по отдельным задачам (уровень квалификации – 6).
		ПК-4 Способен проводить поисковые исследования инновационных технологических процессов в области биологически активных веществ	ПК-4.2 Умеет производить поисковые работы для разработки новых методов получения и анализа биологически активных веществ	
		ПК-5 Способен осуществлять самостоятельные научные исследования в области химии и технологии биологически активных веществ	ПК-5.1. Знает методы получения, особенности производства, свойства и механизмы действия биологически активных веществ различных классов;	

В результате изучения дисциплины студент магистратуры должен:

Знать:

- Основные классы элементоорганических соединений;
- Принципы и методы синтеза элементоорганических соединений;
- Области применения элементоорганических биологически активных веществ.

Уметь:

- Предложить несколько способ синтеза и выбрать наиболее рациональный способ получения элементоорганических соединений;
- По химической структуре элементоорганического соединения, предсказать его свойства в реакциях с соединениями различного химического строения.

Владеть:

- Методами синтеза элементоорганических соединений;
- Принципами разработки элементоорганических биологически активных веществ.

3. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Вид учебной работы	Объем дисциплины		
	ЗЕ	Акад. ч.	Астр. ч.
Общая трудоемкость дисциплины	4	144	108
Контактная работа – аудиторные занятия:	1,41	51	38,25
Лекции	0,47	17	12,75
Практические занятия	0,94	34	25,5
в том числе в форме практической подготовки	0,94	34	25,5
Самостоятельная работа	1,59	57	42,75
Самостоятельное изучение разделов дисциплины	1,59	57	42,75
Вид контроля:			
Экзамен	1	36	27
Контактная работа – промежуточная аттестация	1	0,4	0,3
Подготовка к экзамену.		35,6	26,7
Вид итогового контроля:	Экзамен		

4. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

4.1. Разделы дисциплины и виды занятий

№ п/п	Раздел дисциплины	Академ. часов					
		Всего	в т.ч. в форме пр. подг.	Лекции	Прак. зан.	в т.ч. в форме пр. подг.	Сам. работа
1.	Металлорганические соединения	51	7	12	7	7	32
1.1	Органические производные металлов первой группы	8	-	2	-	-	6
1.2	Органические производные металлов второй группы	10	2	2	2	2	6
1.3	Органические производные металлов третьей группы	10	2	2	2	2	6
	Органические производные металлов четвертой группы	12	2	3	2	2	7
	Органические производные металлов пятой группы	11	1	3	1	1	7
2.	Фосфорорганические соединения	32	6	12	6	6	14
2.1	Общая характеристика и области применения.	17	4	6	4	4	7
2.2	Биологическая активность фосфорорганических соединений	15	2	6	2	2	7
3.	Органические производные серы и селена	25	4	10	4	4	11
3.1	Органические производные серы	12,5	2	5	2	2	5,5
3.2	Селеноорганические соединения	12,5	2	5	2	2	5,5
	ИТОГО	108	17	34	17	17	57
	Экзамен	36					
	ИТОГО	144					

4.2 Содержание разделов дисциплины

Введение

Значение дисциплины «Химия и биологическая активность элементоорганических соединений» для подготовки специалистов в области синтеза биологически активных веществ. Общие представления о химических свойствах элементоорганических соединений в соответствии с положением атома элемента в Периодической таблице Д.И. Менделеева и о способах их получения.

Раздел 1. Металлоорганические соединения

1.1. Органические производные металлов первой группы. Способы получения и химические свойства литий-, натрий и калийорганических соединений. Реакция Вюрца-Фиттига.

1.2. Органические производные металлов второй группы. Магнийорганические соединения. Реакции Барбье и Гриньяра.

1.3. , реакционная способность органических галогенидов, растворители и условия проведения реакций. Использование магний- и литийорганических соединений в органическом синтезе. Цинкорганические соединения. Реакция Реформатского и другие превращения с участием цинкорганических соединений. Ртутьорганические соединения. Способы получения и токсикологические характеристики, этилмеркурхлорид (гранозан). Ртутные загрязнения окружающей среды.

1.4. Органические производные металлов третьей группы. Борорганические соединения. Способы получения боранов, бориновых и бороновых кислот. Бороновые кислоты и их эфиры в органическом синтезе, реакции Сузуки. Фармакологическая активность производных бороновых кислот, нейтронозахватная терапия злокачественных опухолей. Алюминийорганические соединения. Способы получения и свойства. Использование алюминийорганических соединений в органическом синтезе, катализ полимеризации олефинов.

1.5. Органические производные металлов четвертой группы. Кремнийорганические соединения. Кремний в живой природе. Специфика связи атома углерода с атомом кремния. Получение кремнийорганических соединений, особенности технического оформления синтеза кремнийорганических соединений из элементного кремния и органических галогенидов. Реактивы Гриньяра в химии кремнийорганических соединений. Химические свойства кремнийорганических соединений, полисилоксаны. Использование кремнийорганических соединений в качестве биологически активных веществ, силатраны. Метаболизм кремнийорганических соединений. Оловоорганические соединения. Способы получения и свойства органических производных олова, использование в промышленности и в качестве пестицидов. Органические производные свинца. Способы получения и свойства свинецорганических соединений.

1.6. Органические производные металлов пятой группы. Мышьякорганические соединения. Способы получения, реакции Барта, Мейера и Бешама. Токсичность органических производных мышьяка, хлорвинилхлорарсины, фенарсазинхлорид.

Механизм токсического действия мышьякорганических соединений, антидоты. Сальварсан и неосальварсан.

Раздел 2. Фосфорорганические соединения

2.1. Общая характеристика и области применения. Органические производные фосфорной кислоты в живой природе. Номенклатура и классификация фосфорорганических соединений (ФОС). Способы получения органических производных кислот три- и тетракоординированного фосфора, реакции Михаэлиса-Арбузова, Михаэлиса-Беккера и другие способы образования РС-связей, реакция Перкова и фосфонат-фосфатные перегруппировки. Органические производные тиокислот фосфора. Фосфины и фосфониевые соли. Использование ФОС в органическом синтезе: реакции Виттига и Хорнера-Вадсворта-Эммонса.

2.2. Биологическая активность ФОС. Антихолинэстеразные, нейротоксические и антиметаболитные свойства органических производных кислот фосфора. Фосфорорганические отравляющие вещества и инсектоакарициды. Фитоактивные ФОС — глифосат, фосфинотрицин (БАСТА), хлорэтилфосфоновая кислота и карбамоилфосфонаты. Лекарственные средства на основе ФОС: циклофосфан, фосфиномицин, бисфосфонаты и др.

Раздел 3. Органические производные серы и селена 3.1. Описание подраздела

3.1. Органические производные серы. Номенклатура и классификация сераорганических соединений. Способы получения и свойства сульфгидрильных соединений, тиоэфиров и сульфоксидов. Сульфиновые, сульфеновые и сульфоновые кислоты. Применение сераорганических соединений в органическом синтезе, реакции Кори-Чайковски и другие превращения сульфониевых соединений. Соединения серы в живой природе. Серасодержащие аминокислоты, коферменты и простетические группы. Глутатион. Метаболизм природных сераорганических соединений. Токсичные сераорганические соединения.

3.2. Селенорганические соединения. Токсикологические характеристики неорганических и органических производных селена, способы получения и свойства селенорганических соединений. Антиоксидантные свойства селенорганических соединений (эбселен).

5. СООТВЕТСТВИЕ СОДЕРЖАНИЯ ТРЕБОВАНИЙ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

№	В результате освоения дисциплины студент должен:		Раздел 1	Раздел 2	Раздел 3	Раздел 4
	Знать:					
1	– Основные классы элементоорганических соединений;		+	+	+	+
2	– Принципы и методы синтеза элементоорганических соединений;		+	+	+	+
3	– Области применения элементоорганических биологически активных веществ.		+	+	+	+
	Уметь:					
4	– Предложить несколько способ синтеза и выбрать наиболее рациональный способ получения элементоорганических соединений;		+	+	+	+
5	– По химической структуре элементоорганического соединения, предсказать его свойства в реакциях с соединениями различного химического строения.		+	+	+	+
	Владеть:					
6	– Методами синтеза элементоорганических соединений;		+	+	+	+
7	– Принципами разработки элементоорганических биологически активных веществ		+	+	+	+
В результате освоения дисциплины студент должен приобрести следующие <i>профессиональные компетенции и индикаторы их достижения:</i>						
	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК				
8	ПК-2. Способен к поиску, обработке, анализу и систематизации научно-технической информации по теме исследования, выбору методик и средств решения задачи	ПК-2.1. Знает алгоритм поиска, оценки и анализа научно-технической информации;	+	+	+	+
		ПК-2.2. Умеет обобщать и систематизировать научно-техническую информацию;	+	+	+	+
		ПК-2.3. Владеет навыками соотнесения результатов собственной научной работы с отечественным и зарубежным опытом по тематике исследования.	+	+	+	+
9	ПК-4 Способен проводить поисковые исследования инновационных технологических процессов в области биологически активных веществ	ПК-4.2 Умеет производить поисковые работы для разработки новых методов получения и анализа биологически активных веществ	+	+	+	+

10	ПК-5Способен осуществлять самостоятельные научные исследования в области химии и технологии биологически активных веществ	ПК-5.1. Знает методы получения, особенности производства, свойства и механизмы действия биологически активных веществ различных классов;	+	+	+	+

6. ПРАКТИЧЕСКИЕ И ЛАБОРАТОРНЫЕ ЗАНЯТИЯ

6.1. Практические занятия

Примерные темы практических занятий по дисциплине.

№ п/п	№ раздела дисциплины	Темы практических занятий	Часы
1	1	Реакции Барбье и Гриньяра, реактивы Гриньяра в органическом синтезе	2
2		Использование в органическом синтезе цирк- и борорганических соединений	2
3		Химия кремнийорганических соединений	2
4		Химия и биологическая активность органических производных мышьяка	1
6	2	Способы получения эфиров кислот три- и тетракоординированного фосфора	1
7		Зависимость активности от строения в ряду ФОС с антихолинэстеразной активностью	1
8		Способы получения ФОС с РС-связями	1
9		Получение ФОС с инсектицидной активностью	1
10		Фитоактивные ФОС	1
11		Использование ФОС в органическом синтезе	1
12	3	Способы получения и химические свойства сераорганических соединений. Соединения серы в природе	1
14		Использование сераорганических соединений в органическом синтезе	1
15		Химия и биологическая активность селенорганических соединений	2

7. САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА

Самостоятельная работа проводится с целью углубления знаний по дисциплине и предусматривает:

- ознакомление и проработку рекомендованной литературы, работу с электронно-библиотечными системами, включая переводы публикаций из научных журналов, цитируемых в базах Scopus, Web of Science, Chemical Abstracts, РИНЦ;
- посещение отраслевых выставок и семинаров;
- участие в семинарах РХТУ им. И. Менделеева по тематике дисциплины;
- подготовку к выполнению контрольных работ по материалу лекционного курса;
- подготовку к сдаче экзамена по дисциплине.

Планирование времени на самостоятельную работу, необходимого на изучение дисциплины, студентам лучше всего осуществлять на весь период изучения, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала. Материал, законспектированный на лекциях, необходимо регулярно дополнять сведениями из литературных источников, представленных в рабочей программе. При работе с указанными источниками рекомендуется составлять краткий конспект материала, с обязательным фиксированием библиографических данных источника.

8. ПРИМЕРЫ ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ КОНТРОЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Совокупная оценка по дисциплине складывается из оценок за выполнение контрольных работ (максимальная оценка 60 баллов) и итогового контроля в форме экзамена (максимальная оценка 40 баллов).

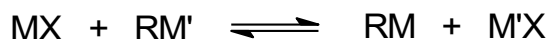
8.1. Примеры контрольных вопросов для текущего контроля освоения дисциплины

Для текущего контроля предусмотрено 3 контрольных работы (по одной контрольной работе по каждому разделу). Максимальная оценка за контрольные работы составляет 20 баллов за каждую.

Раздел 1. Примеры вопросов к контрольной работе № 1. Контрольная работа содержит 2 вопроса, по 10 баллов за вопрос.

Вопрос 1.1.

1. Приведите конкретные примеры и условия проведения реакции, соответствующей общей схеме



2. Реакция магнийорганических соединений с карбонильными соединениями, со сложными эфирами, с ортоэфирами.

3. Способы получения литийорганических соединений. Условия проведения реакций, побочные реакции.

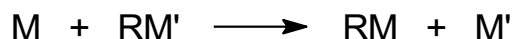
4. Способы получения и свойства ртутьорганических соединений.

Вопрос 1.2.

1. Способы получения цинкорганических соединений.

2. Синтез реактивов Гриньяра, исходные соединения, растворители.

3. Приведите конкретные примеры и условия проведения реакции, соответствующей общей схеме



4. Использование цинкорганических соединений в органическом синтезе, реакция Реформатского, цинкорганические соединения в синтезе кетонов

Раздел 2. Примеры вопросов к контрольной работе № 2. Контрольная работа содержит 2 вопроса, по 10 баллов за вопрос.

Вопрос 2.1.

1. Три возможных направления использования кремнийорганических соединений в химии биологически активных соединений, привести примеры.

2. Получение соединений с РС-связями на основе гидрофосфорильных соединений.

3. Способы получения кремнийорганических соединений.

4. Реакции Виттига и Хорнера-Вадсворта-Эммонса.

Вопрос 2.2.

1. Способы получения эфиров кислот трикоординированного фосфора.

2. Реакция Абрамова и фосфонат-фосфатная перегруппировка.

3. Способы получения и свойства арилбороновых кислот.
4. Реакция Михаэлиса-Арбузова, реакционная способность исходных соединений и побочные продукты.

Раздел 3. Примеры вопросов к контрольной работе № 3. Контрольная работа содержит 2 вопроса, по 10 баллов за вопрос.

Вопрос 3.1.

1. Антихолинэстеразная активность фосфорорганических соединений. Обратимое и необратимое ингибирование холинэстеразы. Реактивация холинэстеразы производными гидроксиламина.
2. Механизм токсического действия мышьякорганических соединений. Антидоты при отравлениях производными тяжелых металлов.
3. Гербицидная активность фосфометилглицина (гдифосата). Способы его получения. Экологические последствия широкого использования глифосата.
4. Получение мышьякорганических соединений по реакциям Барта и Мейера.

Вопрос 3.2.

1. Зависимость токсичности от строения для фосфорорганических соединений, эмпирическая формула Шрадера. Примеры соединений с инсектицидной активностью, механизм выработки резистентности.
2. Взаимодействие трихлорида мышьяка с ароматическими соединениями и с ацетиленом, токсичность α -, β - и γ -льюизита. Фенарсазинхлорид (адамсит).
3. Фосфорорганические соединения с противовирусной активностью. Получение фосфонуксусной кислоты и тринатриевой соли фосфонкарбоновой кислоты. Механизм противовирусной активности.
4. Получение хлорофоса и дихлофоса (ДДВФ). Метаболическое превращение с образованием токсичных соединений на примере хлорофоса («летальный синтез»).

8.3. Вопросы для итогового контроля освоения дисциплины (2 семестр – экзамен)

Экзаменационный билет включает контрольные вопросы по всем разделам рабочей программы дисциплины и содержит 3 вопроса. 1 вопрос – 15 баллов, вопрос 2 – 15 баллов, вопрос 3 – 10 баллов.

1. Реакция Кабачника-Филдса и реакция Пудовика.
2. Основные способы получения металлоорганических соединений.
3. Химические свойства и способы получения литийорганических соединений.
4. Получение алкиларсоновых кислот по реакции Меера, получение ариларсоновых кислот по реакции Барта.
5. Реакции литий- и магнийорганических соединений с альдегидами, кетонами и сложными эфирами.
6. Номенклатура фосфорорганических соединений.
7. Роль растворителей при получении литий- и магнийорганических соединений.
8. Получение диметилового эфира 1-гидрокси-2,2,2-трихлорэтилфосфоновой кислоты, фосфонат-фосфатная перегруппировка в присутствии оснований.

9. Способы получения и практическое использование органических производных свинца.
10. Способы получения карбонильных соединений из реактивов Гриньяра, ортоэфиров и нитрилов карбоновых кислот.
11. Реакции ацидолиза при получении диалкилфосфитов. Окисление и галогенирование диалкилфосфитов.
12. Получение сильных аналогов биологически активных веществ. Их метаболизм.
13. Способы получения и свойства алюминийорганических соединений.
14. Жидкость Кадэ. Хлорвинилхлорарсины, получение, токсикологические характеристики.
15. Получение арилбороновых кислот и использование их в реакции Сузуки.
16. Взаимодействие α -галогензамещенных кетонов с триалкилфосфитами (реакция Перкова).
17. Способы получения арильных хлорарсинов, их биологическая активность.
18. Способы получения кремнийорганических соединений, силиконовые полимеры.
19. Реакции Барта и Несмеянова.
20. Способы получения диэфиров фосфористой кислоты, реакция Абрамова.
21. Реакция Вюрца-Фиттига, роль натрийорганических соединений в реакциях арилхлоридов с металлическим натрием при получении элементоорганических соединений.
22. Присоединение диалкилфосфитов к кратным связям, реакция Абрамова. Образование карбамоилфосфатов и реакция Пудовика.
23. Способы получения цинкорганических соединений и их использование в реакции Реформатского и для получения карбонильных соединений.
24. Ртутьорганические соединения. Способы получения, химические свойства и токсичность. Гранозан (этилмеркурхлорид).
25. Превращения функционализированных по β -положению кремнийорганических соединений.
26. Ингибирование холинэстеразы соединениями с ацилирующей способностью, особенности ингибирования производными кислот фосфора, формула Шрадера.
27. Способ получения и биологическая активность силатранов.
28. Получение полных ариловых и алкиловых эфиров фосфористой кислоты.
29. Способы получения и практическое использование оловоорганических соединений.
30. Механизм реакции Михаэлиса-Арбузова, побочные реакции.
31. Способы получения мышьякорганических соединений, Реакция Бешама, сальварсан.
32. Механизм реакции Михаэлиса-Беккера, получение натриевой соли диалкилфосфористой кислоты, побочные реакции.
33. Синтез соединений с РС-связями на основе диэфиров фосфористой кислоты: реакции Михаэлиса-Беккера, Кабачника-Филдса.
34. Бактерицидная активность фосфомицина, его получение.

35. Антихолинэстеразная активность фосфорорганических соединений. Обратимое и необратимое ингибирование холинэстеразы. Реактивация холинэстеразы производными гидроксилamina.

36. Механизм токсического действия мышьякорганических соединений. Антидоты при отравлениях производными тяжелых металлов.

37. Гербицидная активность фосфометилглицина (глифосата). Способы его получения. Экологические последствия широкого использования глифосата.

38. Получение мышьякорганических соединений по реакциям Барта и Мейера.

39. Зависимость токсичности от строения для фосфорорганических соединений, эмпирическая формула Шрадера. Примеры соединений с инсектицидной активностью, механизм выработки резистентности.

40. Взаимодействие трихлорида мышьяка с ароматическими соединениями и с ацетиленом, токсичность α -, β - и γ -льюзита. Фенарсазинхлорид (адамсит).

41. Фосфорорганические соединения с противовирусной активностью. Получение фосфонуксусной кислоты и тринатриевой соли фосфонкарбоновой кислоты. Механизм противовирусной активности.

42. Получение хлорофоса и дихлорофоса (ДДВФ). Метаболическое превращение с образованием токсичных соединений на примере хлорофоса («летальный синтез»).

43. Три возможных направления использования кремнийорганических соединений в химии биологически активных соединений, привести примеры.

44. Получение соединений с РС-связями на основе гидрофосфорильных соединений.

45. Способы получения кремнийорганических соединений.

46. Реакция Виттига. Получение алкилиденфосфоранов, использование их для синтеза ненасыщенных соединений.

47. Реакция Хорнера-Вадсворта-Эммонса, получение исходных фосфонацетатов, синтез метопрена.

48. Способы получения эфиров кислот трикоординированного фосфора.

49. Реакция Абрамова и фосфонат-фосфатная перегруппировка.

50. Способы получения и свойства арилбороновых кислот.

51. Реакция Михаэлиса-Арбузова, реакционная способность исходных соединений и побочные продукты.

52. Способы получения и свойства сульфокислот алифатического и ароматического ряда.

53. Получение илидных соединений из диалкилсульфидов и сульфоксидов. Синтез на их основе эпоксидов и циклопропанов.

54. Соединения серы в живой природе, глутатион в качестве нейтрализатора пероксидных соединений и алкилаторов.

55. Синтез и свойства тиольных соединений алифатического ряда.

56. Синтез тиольных соединений ароматического ряда.

57. Селенорганические соединения в живой природе. Глутатионпероксидаза, механизм детоксикации пероксидов.

58. Биологическая активность синтетических селеноорганических соединений. Получение и антиоксидантная активность эбселена.

59. Взаимодействие метилхлорида с металлическим кремнием, продукты реакции и использование их для получения кремнийорганических полимеров.

60. Истинная и ложная холинэстеразы, их роль в организме. Механизм судорожно-паралитического действия ингибиторов холинэстераз. Нейротоксические фосфорорганические соединения.

Фонд оценочных средств приведен в виде отдельного документа, являющегося неотъемлемой частью основной образовательной программы.

8.4. Структура и примеры билетов для экзамена

Экзамен по дисциплине «Химия и биологическая активность элементарорганических соединений» проводится во 2-м семестре и включает контрольные вопросы по всем разделам рабочей программы дисциплины. Билет для экзамена состоит из 3-х вопросов, относящихся к указанным разделам.

Пример билета для экзамена:

<i>«Утверждаю» Зав. каф. ХТБМП</i> _____ М.С. Ощепков «__» _____ 20__ г.	Министерство науки и высшего образования РФ
	Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева
	Кафедра химии и технологии биомедицинских препаратов
	18.04.01 Химическая технология Магистерская программа – «Химия и технология биологически активных веществ»
	«Химия и биологическая активность элементарорганических соединений»
Билет № 1 1. Химические свойства и способы получения литийорганических соединений 2. Способы получения и свойства сульфокислот алифатического и ароматического ряда. 3. Механизм реакции Михаэлиса-Арбузова, побочные реакции	

9. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

9.1. Рекомендуемая литература

А. Основная литература

1. Коваленко Л.В., Ощепков М.С., Соловьева И.Н. Химия и биологическая активность фосфорорганических соединений, учебное пособие. Москва: РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2015. - 156 с.

2. Коваленко Л.В., Кочетков К.А. Металлорганические соединения, учебное пособие. Москва: РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2016. - 120 с.

3. Травень В. Ф. Органическая химия: учебник для вузов, в 3 т. / В. Ф. Травень. - Москва: БИНОМ Лаборатория знаний, 2004. – 517 с. (Базовый учебник).

Б. Дополнительная литература

1. Бухаров С.В., Илалдинов И.З., Климентова Г.Ю., Нугуманова Г.Н. Технология тонкого органического синтеза. Ч. III. Элементоорганические соединения / С. В. Бухаров, И. З. Илалдинов, Г. Ю. Климентова, Г. Н. Нугуманова. — Казань: КНИТУ, 2006. — 72 с. — Текст: электронный // Лань: электронно-библиотечная система. — URL: https://e.lanbook.com/book/13344?category_pk=3863 (дата обращения: 01.09.2022).

9.2. Рекомендуемые источники научно-технической информации

- Раздаточный иллюстративный материал к лекциям.
- Презентации к лекциям.
- Ресурсы информационно–телекоммуникационной сети Интернет:
- Ресурсы American Chemical Society: <http://www.acs.org/content/acs/en.html/>
- Ресурсы Royal Society of Chemistry: <http://pubs.rsc.org/>
- Ресурсы Издательства Wiley: <http://onlinelibrary.wiley.com/>
- Ресурсы ELSEVIER: www.sciencedirect.com

10. ПЕРЕЧЕНЬ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ В ОБРАЗОВАТЕЛЬНОМ ПРОЦЕССЕ

Информационную поддержку изучения дисциплины осуществляет Информационно-библиотечный центр (ИБЦ) РХТУ им. Д.И. Менделеева, который обеспечивает обучающихся основной учебной, учебно-методической и научной литературой, необходимой для организации образовательного процесса по дисциплине. Общий объем многоотраслевого фонда ИБЦ на 01.01.2024 г. составляет 1 559 436 экз.

Фонд ИБЦ располагает учебной, учебно-методической и научно-технической литературой в форме печатных и электронных изданий, а также включает официальные, справочно-библиографические, специализированные отечественные и зарубежные периодические и информационные издания. ИБЦ обеспечивает доступ к профессиональным базам данных, информационным, справочным и поисковым системам.

Каждый обучающийся обеспечен свободным доступом из любой точки, в которой имеется доступ к сети Интернет и к электронно-библиотечной системе (ЭБС) Университета, которая содержит различные издания по основным изучаемым дисциплинам и сформирована по согласованию с правообладателями учебной и учебно-методической литературы.

Для более полного и оперативного справочно-библиографического и информационного обслуживания в ИБЦ реализована технология Электронной доставки документов.

Полный перечень электронных информационных ресурсов, используемых в процессе обучения, представлен в основной образовательной программе.

11. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

В соответствии с учебным планом занятия по дисциплине «Химия и биологическая активность элементоорганических соединений» проводятся в форме лекций, практических занятий и самостоятельной работы обучающегося.

11.1. Оборудование, необходимое в образовательном процессе:

Лекционная учебная аудитория, оборудованная электронными средствами демонстрации (компьютер со средствами звуковоспроизведения, проектор, экран) и учебной мебелью.

11.2. Учебно-наглядные пособия:

Иллюстрации к разделам лекционного курса и практическим занятиям; графики и таблицы, иллюстрирующие лекционный материал.

11.3. Компьютеры, информационно-телекоммуникационные сети, аппаратно-программные и аудиовизуальные средства:

Персональные компьютеры в аудитории для самостоятельной подготовки обучающихся, укомплектованные принтерами и программными средствами; проекторы и экраны; цифровые камеры; копировальные аппараты; локальная сеть с выходом в Интернет.

11.4. Печатные и электронные образовательные и информационные ресурсы:

Электронные образовательные ресурсы: электронные презентации к разделам лекционного курса; учебно-методические разработки в электронном виде.

11.5. Перечень лицензионного программного обеспечения:

№ п/п	Наименование программного продукта	Реквизиты договора поставки	Примечание	Срок окончания действия лицензии
1.	Microsoft Office Standard 2013	Контракт № 62-64ЭА/2013 от 02.12.2013	Лицензия на ПО, принимающее участие в образовательных процессах.	бессрочная
2.	Microsoft Office Professional Plus 2019 В составе: Word, Excel, Power Point, Outlook, OneNote, Access, Publisher, InfoPath	Контракт № 28-35ЭА/2020 от 26.05.2020	Лицензия на ПО, принимающее участие в образовательных процессах.	12 месяцев (ежегодное продление подписки с правом перехода на обновлённую версию продукта)
3.	Kaspersky Endpoint Security для бизнеса – Стандартный Russian Edition.	Контракт № 90-133ЭА/2021 от 07.09.2021	Лицензия на ПО, не принимающее прямого участия в образовательных процессах (инфраструктурное/вспомогательное ПО)	12 месяцев (ежегодное продление подписки с правом перехода на обновлённую версию продукта)

12. ТРЕБОВАНИЯ К ОЦЕНКЕ КАЧЕСТВА ОСВОЕНИЯ ПРОГРАММЫ

Наименование разделов	Основные показатели оценки	Формы и методы контроля и оценки
Раздел 1. Металлорганические соединения	<i>Знает:</i> – Основные классы элементоорганических соединений; – Принципы и методы синтеза элементоорганических соединений; – Области применения элементоорганических биологически активных веществ. <i>Умеет:</i> – Предложить несколько способ синтеза и выбрать наиболее рациональный способ получения элементоорганических соединений; – По химической структуре элементоорганического соединения, предсказать его свойства в реакциях с соединениями различного химического строения. <i>Владеет:</i> – Методами синтеза элементоорганических соединений; – Принципами разработки элементоорганических биологически активных веществ.	Оценка за контрольную работу №1 Оценка за экзамен
Раздел 2. Фосфорорганические соединения	<i>Знает:</i> – Основные классы элементоорганических соединений; – Принципы и методы синтеза элементоорганических соединений; – Области применения элементоорганических биологически активных веществ. <i>Умеет:</i> – Предложить несколько способ синтеза и выбрать наиболее рациональный способ получения элементоорганических соединений; – По химической структуре элементоорганического соединения, предсказать его свойства в реакциях с соединениями различного химического строения. <i>Владеет:</i> – Методами синтеза элементоорганических соединений; – Принципами разработки	Оценка за контрольную работу №2 Оценка за экзамен

	элементоорганических биологически активных веществ.	
Раздел 3. Органические производные серы и селена	<i>Знает:</i> – Основные классы элементоорганических соединений; – Принципы и методы синтеза элементоорганических соединений; – Области применения элементоорганических биологически активных веществ. <i>Умеет:</i> – Предложить несколько способ синтеза и выбрать наиболее рациональный способ получения элементоорганических соединений; – По химической структуре элементоорганического соединения, предсказать его свойства в реакциях с соединениями различного химического строения. <i>Владеет:</i> – Методами синтеза элементоорганических соединений; – Принципами разработки элементоорганических биологически активных веществ.	Оценка за контрольную работу №3 Оценка за экзамен

13. ОСОБЕННОСТИ ОРГАНИЗАЦИИ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО ПРОЦЕССА ДЛЯ ИНВАЛИДОВ И ЛИЦ С ОГРАНИЧЕННЫМИ ВОЗМОЖНОСТЯМИ ЗДОРОВЬЯ

Обучение инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья осуществляется в соответствии с:

- Порядком организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры (Приказ Министерства науки и высшего образования Российской Федерации от 06.04.2021 № 245);

- Положением о порядке организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева», принятым решением Ученого совета РХТУ им. Д.И. Менделеева от 28.12.2022, протокол № 5;

- Методическими рекомендациями по организации образовательного процесса для обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья в образовательных организациях высшего образования, в том числе оснащённости образовательного процесса (утверждены заместителем Министра образования и науки РФ А.А. Климовым от 08.04.2014 № АК-44/05вн).

**Дополнения и изменения к рабочей программе дисциплины
«Химия и биологическая активность элементоорганических соединений»**

**основной образовательной программы
по направлению подготовки 18.04.01 Химическая технология,
магистерская программа – «Химия и технология биологически активных веществ»**

Форма обучения: **очная**

Номер изменения/ дополнения	Содержание дополнения/изменения	Основание внесения изменения/дополнения
1.		протокол заседания Ученого совета №_____от «___»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «___»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «___»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «___»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «___»_____20__г.

**Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Российский химико-технологический университет
имени Д.И. Менделеева»**

«УТВЕРЖДЕНО»

на заседании Ученого совета

РХТУ им. Д.И. Менделеева

протокол № 1 от «29» августа 2024 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

**«Применение САПР для проектирования производств биологически активных
веществ и химико-фармацевтических средств»**

Направление подготовки 18.04.01 Химическая технология
(Код и наименование направления подготовки)

**Магистерская программа – «Химия и технология биологически активных
веществ»**
(Наименование магистерской программы)

Квалификация «магистр»

Москва 2024

Программа составлена преподавателями кафедры химии и технологии органического синтеза РХТУ имени Д.И. Менделеева:

к.х.н., доцент кафедры химии и технологии органического синтеза РХТУ имени Д.И. Менделеева С.Н. Мантров;

ассистент кафедры химии и технологии органического синтеза РХТУ имени Д.И. Менделеева П.А. Нефёдов.

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры химии и технологии органического синтеза

«26» апреля 2024 г., протокол №7

1. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ

Программа составлена в соответствии с требованиями Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования – магистратура по направлению подготовки **18.04.01 Химическая технология** (ФГОС ВО), рекомендациями Методической комиссии и накопленным опытом преподавания дисциплины кафедрой **Химии и технологии органического синтеза** РХТУ им. Д.И. Менделеева. Программа рассчитана на изучение дисциплины в течение одного семестра.

Дисциплина **"Применение САПР для проектирования производств биологически активных веществ и химико-фармацевтических средств"** относится к дисциплинам по выбору части дисциплин учебного плана, формируемой участниками образовательных отношений и рассчитана на изучение в одном семестре. Программа дисциплины предполагает, что обучающиеся имеют теоретическую и практическую подготовку в области органического синтеза, в частности в области химии и технологии органических веществ, а также в области процессов и аппаратов химической технологии, физической химии и общей химической технологии.

Цель дисциплины — повышение научно-технической и методологической компетенции магистранта, необходимых для решения задач, связанных с проектированием и расчетом промышленных химико-технологических систем при помощи ЭВМ средствами систем автоматизированного проектирования ChemCAD, HYSYS, ChemProject.

Задачи дисциплины:

- освоить современные методы расчета гидродинамической, теплообменной, массообменной аппаратуры и оптимизации параметров химико-технологических систем;
- изучить принципы проектирования современных производств биологически активных веществ и методы расчета аппаратов в программных комплексах ChemCAD и HYSYS;
- сформировать навыки работы в программных пакетах САПР для проектных расчетов, связанных материальными и энергетическими потоками аппаратов, составляющих комплекс производства и умения строить и анализировать зависимость изменения условий проведения процесса в одном аппарате на параметры всей системы.

Дисциплина **"Применение САПР для проектирования производств биологически активных веществ и химико-фармацевтических средств"** преподается в 1 семестре. Контроль успеваемости студентов ведется по принятой в университете рейтинговой системе.

Рабочая программа дисциплины может быть реализована с применением электронных образовательных технологий и электронного обучения полностью или частично.

2. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Изучение дисциплины направлено на приобретение следующих **компетенций и индикаторов их достижения:**

Профессиональные компетенции и индикаторы их достижения:

Задача профессиональной деятельности	Объект или область знания	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК	Основание (профессиональный стандарт, анализ опыта) Обобщенные трудовые функции
Научно-исследовательский тип задач профессиональной деятельности				
Выполнение фундаментальных и прикладных работ поискового, теоретического и экспериментального характера с целью определения технических характеристик новой техники, а также комплекса работ по разработке технологической документации.	Химическое, химико-технологическое производство Сквозные виды профессиональной деятельности в промышленности (в сфере организации и проведения научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ в области химического и химико-	ПК-2. Способен к поиску, обработке, анализу и систематизации научно-технической информации по теме исследования, выбору методик и средств решения задачи	ПК-2.1. Знает алгоритм поиска, оценки и анализа научно-технической информации.	Профессиональный стандарт 40.011 «Специалист по научно-исследовательским и опытно-конструкторским разработкам», утвержденный приказом Министерства труда и социальной защиты Российской Федерации от 04.03.2014 № 121 н, Обобщенная трудовая функция С. Проведение научно-исследовательских и опытно-конструкторских разработок. С /01.6. Осуществление научного руководства проведением исследований по отдельным задачам (уровень квалификации – 6).
			ПК-2.2. Умеет обобщать и систематизировать научно-техническую информацию.	
			ПК-2.3. Владеет навыками соотнесения результатов собственной научной работы с отечественным и зарубежным опытом по тематике исследования.	

Задача профессиональной деятельности	Объект или область знания	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК	Основание (профессиональный стандарт, анализ опыта) Обобщенные трудовые функции
	технологического производства).	ПК-4. Способен проводить поисковые исследования инновационных технологических процессов в области биологически активных веществ.	ПК-4.2. Умеет производить поисковые работы для разработки новых методов получения и анализа биологически активных веществ.	
		ПК-5. Способен осуществлять самостоятельные научные исследования в области химии и технологии биологически активных веществ.	ПК-5.1. Знает методы получения, особенности производства, свойства и механизмы действия биологически активных веществ различных классов.	
			ПК-5.3. Умеет использовать теоретические знания по химии и технологии биологически активных веществ для решения конкретных задач научно-исследовательской деятельности.	

В результате изучения дисциплины студент магистратуры должен:

Знать:

- современные методы расчета гидродинамической, теплообменной, массообменной аппаратуры с помощью систем автоматизированного проектирования ChemCAD, HYSYS и ChemProject;
- теоретические основы методик расчета современной промышленной аппаратуры в зависимости от задачи;
- основы расчета реакторов смешения и вытеснения с использованием сложных кинетических зависимостей проводимых процессов средствами САПР;
- принципы расчета и выбора методов разделения индивидуальных компонентов в производствах БАВ с помощью систем автоматизированного проектирования.

Уметь:

- использовать программные пакеты ChemCAD, HYSYS и ChemProject для расчета заданных свойств при требуемых параметрах системы;
- использовать программные пакеты ChemCAD, HYSYS и ChemProject для проектных расчетов отдельных аппаратов химико-технологического профиля;
- использовать программные пакеты САПР для проектных расчетов, связанных материальными и энергетическими потоками аппаратов, составляющих комплекс производства и уметь строить и анализировать зависимость изменения условий проведения процесса в одном аппарате на параметры всей системы.

Владеть:

- методами расчета аппаратов, используемых в производствах биологически активных веществ;
- теоретическими основами современных методов компьютерного расчета массообменных и теплообменных процессов;
- принципами проектирования крупных современных производств биологически активных веществ.

3. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Вид учебной работы	Объем дисциплины		
	ЗЕ	Акад. ч.	Астр.ч.
Общая трудоемкость дисциплины	4	144	108
Контактная работа – аудиторные занятия:	1,42	51	38,25
в том числе в форме практической подготовки	0,47	17	12,75
Лекции	0,47	17	12,75
Практические занятия	0,95	34	25,5
<i>в том числе в форме практической подготовки</i>	<i>0,47</i>	<i>17</i>	<i>12,75</i>
Самостоятельная работа	0,95	57	42,75
Самостоятельное изучение разделов дисциплины	1,58	57	42,75
Вид контроля:			
Экзамен	1	36	27
Контактная работа – промежуточная аттестация	1	0,3	0,23
Подготовка к экзамену.		35,7	26,77
Вид итогового контроля:	Экзамен		

4. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

4.1. Разделы дисциплины и виды занятий

№ п/п	Раздел дисциплины	Академ. часов								
		Всего	в т.ч. в форм е пр. подг.	Лек- ции	в т.ч. в форм е пр. подг.	Прак. зан.	в т.ч. в форм е пр. подг.	Лаб. рабо- ты	в т.ч. в форм е пр. подг.	Сам. рабо- та
1.	Введение	2	-	1	-	-	-	-	-	1
2.	Раздел 1. Современные методы расчета свойств материальных потоков.	5	2	1	-	2	2	-	-	2
3.	Раздел 2. Программные методы расчета и моделирования теплообменной аппаратуры.	5	2	1	-	2	2	-	-	2
4.	Раздел 3. Программные методы расчета и моделирования массообменной аппаратуры разделения материальных потоков.	21	8	3	-	8	8	-	-	10
5.	Раздел 4. Современные методы расчета химических реакторов и моделирования химических реакций.	36	12	6	-	12	12	-	-	18
6.	Раздел 5. Современные методы моделирования химико-технологических систем в производствах БАВ.	26	6	3	-	6	6	-	-	17

7.	Раздел 6. Современные методы автоматизированного расчета себестоимости химического производства	13	4	2	-	4	4	-	-	7
	ИТОГО	108	34	17	-	34	34	-	-	57
	Экзамен	0,4								
	Подготовка к экзамену	35,6								
	ИТОГО	144								

4.2. Содержание разделов дисциплины

Введение.

Описание основных разделов курса. Структура курса и правила рейтинговой системы. Знакомство с современными системами автоматизированного проектирования в химической технологии, с базами данных.

Раздел 1. Современные методы расчета свойств материальных потоков. Методы расчета свойств потоков растворов и парогазовых смесей по экспериментальным данным. Моделирование и построение графиков и диаграмм свойств потока в зависимости от термобарических условий. Применение и реализация расчетов в различных базах данных.

Раздел 2. Программные методы расчета и моделирования теплообменной аппаратуры. Расчет кожухотрубчатых, воздушных и пластинчатых теплообменных аппаратов в программных пакетах ChemCAD и HYSYS. Подбор составных частей теплообменной аппаратуры в зависимости от условий. Поверочный и проектный расчет теплообменников без фазовых переходов. Поверочный и проектный расчет испарителей. Поверочный и проектный расчет конденсаторов. Стоимостные расчеты.

Раздел 3. Программные методы расчета и моделирования массообменной аппаратуры разделения материальных потоков. Виды расчетов ректификационных колонн. Моделирование и построение диаграмм ТР-ХУ. Моделирование сепараторов. Моделирование простой перегонки. Расчет модуля ректификации Shor. Расчет модуля ректификации Tower. Расчет модуля ректификации/абсорбции с учетом химической реакции SCDS. Абсорбция с использованием пакетов расчета равновесной диссоциации электролитов. Моделирование ректификации в динамике.

Раздел 4. Современные методы расчета химических реакторов и моделирования химических реакций. Виды расчетов химических реакторов в производствах БАВ. Стехиометрические реактора. Термодинамические реактора. Равновесные реактора. Кинетические реактора. Модуль расчета Batch. Химические реактора в динамическом и стационарном режиме.

Раздел 5. Современные методы моделирования химико-технологических систем в производствах БАВ. Основы построения химико-технологических систем в производствах БАВ. Комплексные подходы к расчету систем к замкнутым контурам рециркуляции. Моделирование и использование средств автоматизации и контроля. Анализ параметрической чувствительности. Оптимизация.

Раздел 6. Современные методы автоматизированного расчета себестоимости химического производства. Расчет стоимости материалов и реагентов для синтеза химических веществ. Расчет стоимости выделения индивидуальных веществ из реакционной массы. Расчет временных затрат. Комплексный расчет себестоимости производства.

5. СООТВЕТСТВИЕ СОДЕРЖАНИЯ ТРЕБОВАНИЙ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

№	В результате освоения дисциплины студент должен:	Раздел 1	Раздел 2	Раздел 3	Раздел 4	Раздел 5	Раздел 6
	Знать:						
1	современные методы расчета гидродинамической, теплообменной, массообменной аппаратуры с помощью систем автоматизированного проектирования ChemCAD, HYSYS и ChemProject;	+	+	+	+	+	-
2	теоретические основы методик расчета современной промышленной аппаратуры в зависимости от задачи;	+	+	+	+	+	-
3	основы расчета реакторов смешения и вытеснения с использованием сложных кинетических зависимостей проводимых процессов средствами САПР;	-	-	-	+	+	-
4	принципы расчета и выбора методов разделения индивидуальных компонентов в производствах БАВ с помощью систем автоматизированного проектирования;	-	+	+	-	-	-
	Уметь:						
5	использовать программные пакеты ChemCAD, HYSYS и ChemProject для расчета заданных свойств при требуемых параметрах системы;	+	+	+	+	+	+
6	использовать программные пакеты ChemCAD, HYSYS и ChemProject для проектных расчетов отдельных аппаратов химико-технологического профиля;	+	+	+	+	+	-
7	использовать программные пакеты САПР для проектных расчетов, связанных материальными и энергетическими потоками аппаратов, составляющих комплекс производства и уметь строить и анализировать зависимость изменения условий проведения процесса в одном аппарате на параметры всей системы;	-	-	+	+	+	-
	Владеть:						
8	методами расчета аппаратов, используемых в производствах биологически активных веществ;	-	+	+	+	+	-
9	теоретическими основами современных методов компьютерного расчета массообменных и теплообменных процессов;	+	+	+	+	+	-
10	принципами проектирования крупных современных производств биологически активных веществ;	-	+	+	+	+	+

	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК						
11	ПК-2. Способен к поиску, обработке, анализу и систематизации научно-технической информации по теме исследования, выбору методик и средств решения задачи	ПК-2.1. Знает алгоритм поиска, оценки и анализа научно-технической информации.	+	+	+	+	+	+
12		ПК-2.2. Умеет обобщать и систематизировать научно-техническую информацию.	+	+	+	+	+	+
13		ПК-2.3. Владеет навыками соотнесения результатов собственной научной работы с отечественным и зарубежным опытом по тематике исследования.	+	+	+	+	+	+
14	ПК-4. Способен проводить поисковые исследования инновационных технологических процессов в области биологически активных веществ.	ПК-4.2. Умеет производить поисковые работы для разработки новых методов получения и анализа биологически активных веществ.	+	+	+	+	+	+
15	ПК-5. Способен осуществлять самостоятельные научные исследования в области химии и технологии биологически активных веществ.	ПК-5.1. Знает методы получения, особенности производства, свойства и механизмы действия биологически активных веществ различных классов.	-	+	+	+	+	+

16		ПК-5.3. Умеет использовать теоретические знания по химии и технологии биологически активных веществ для решения конкретных задач научно-исследовательской деятельности.	+	+	+	+	+	+

6. ПРАКТИЧЕСКИЕ ЗАНЯТИЯ

6.1. Практические занятия

Примерные темы практических занятий по дисциплине.

№ п/п	№ раздела дисциплины	Темы практических занятий	Количество акад. часов
1	1	Знакомство с современными САПР производств БАВ.	2
2	2	Современные методы расчета свойств материальных потоков.	2
3	3	Программные методы расчета и моделирования теплообменной аппаратуры. Проектные расчеты в программных пакетах ChemCAD и HYSYS.	8
4	4	Программные методы расчета и моделирования массообменной аппаратуры разделения материальных потоков. Ректификация и сепараторы.	12
5	5	Современные методы расчета химических реакторов и моделирования химических реакций. Стехиометрические реактора. Термодинамические реактора. Равновесные реактора.	1,5
6		Современные методы расчета химических реакторов и моделирования химических реакций. Кинетические реактора.	1,5
7		Современные методы расчета химических реакторов и моделирования химических реакций. Модуль Batch.	1,5
8		Современные методы расчета химических реакторов и моделирования химических реакций. Динамические расчеты.	1,5
9	6	Современные методы моделирования химико-технологических систем. Оптимизация и анализ.	2
10		Современные методы автоматизированного расчета себестоимости химического производства.	2
Итого:			34

6.2. Лабораторные занятия

Выполнение лабораторного практикума учебным планом дисциплины *«Применение САПР для проектирования производств биологически активных веществ и химико-фармацевтических средств»* не предусмотрено.

7. САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА

Самостоятельная работа проводится с целью углубления знаний по дисциплине и предусматривает:

- ознакомление и проработку рекомендованной литературы, работу с электронно-библиотечными системами, включая переводы публикаций из научных журналов, цитируемых в базах Scopus, Web of Science, Chemical Abstracts, РИНЦ;
- посещение отраслевых выставок и семинаров, участие в семинарах РХТУ им. И. Менделеева по тематике курса;
- регулярную проработку пройденного на лекциях и практических занятиях учебного материала, подготовку к выполнению контрольных работ по материалу лекционного курса;
- подготовку к сдаче расчетно-графической работы (1 семестр);
- подготовку к сдаче *экзамена* (1 семестр) по курсу.

Планирование времени на самостоятельную работу, необходимого на изучение дисциплины, студентам лучше всего осуществлять на весь период изучения, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала. Материал, законспектированный на лекциях, необходимо регулярно дополнять сведениями из литературных источников, представленных в учебной программе. При работе с указанными источниками рекомендуется составлять краткий конспект материала, с обязательным фиксированием библиографических данных источника.

8. ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА ДЛЯ КОНТРОЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Совокупная оценка по дисциплине складывается из оценок за выполнение контрольных работ (максимальная оценка 35 баллов), расчетно-графической работы (25 баллов) и итогового контроля в форме *экзамена* (максимальная оценка 40 баллов).

8.1. Примеры тем расчетно-графической работы.

Для текущего контроля предусмотрено выполнение расчетно-графической работы (25 баллов).

1. На основе предложенных литературных данных предложить и рассчитать производство нитроглицерина производительностью 25 т/год. Выполнить поверочный и проектный расчет каждого из аппаратов, а также оптимизацию по себестоимости производства. Для управления производства предложить систему автоматизированного управления процессом.

2. На основе предложенных литературных данных предложить и рассчитать производство ацетилсалициловой кислоты производительностью 15 т/год. Выполнить поверочный и проектный расчет каждого из аппаратов, а также оптимизацию по себестоимости производства. Для управления производства предложить систему автоматизированного управления процессом.

3. На основе предложенных литературных данных предложить и рассчитать производство 2,4-D производительностью 50 т/год. Выполнить поверочный и проектный расчет каждого из аппаратов, а также оптимизацию по себестоимости производства. Для управления производства предложить систему автоматизированного управления процессом.

4. На основе предложенных литературных данных предложить и рассчитать производство гетероауксина производительностью 500 т/год. Выполнить поверочный и проектный расчет каждого из аппаратов, а также оптимизацию по себестоимости

производства. Для управления производства предложить систему автоматизированного управления процессом.

5. На основе предложенных литературных данных предложить и рассчитать производство ДДТ производительностью 15 т/год. Выполнить поверочный и проектный расчет каждого из аппаратов, а также оптимизацию по себестоимости производства. Для управления производства предложить систему автоматизированного управления процессом.

8.2. Примеры контрольных вопросов для текущего контроля освоения дисциплины

Для текущего контроля предусмотрено 2 контрольные работы (по одной контрольной работе: по разделам 1-3 и по 4-6. Максимальная оценка за контрольные работы №1 и №2 (1 семестр) составляет 35 баллов, 15 баллов за контрольную работу №1 и 20 баллов за контрольную работу №2. 25 баллов отводятся на расчетно-графическую работу.

Раздел 1-3. Примеры вопросов к контрольной работе № 1. Максимальная оценка – 15 баллов. Контрольная работа содержит 6 вопросов: 1 вопрос – 1 балл, 2 вопрос – 1 балл, 3 вопрос - 2 балла, 4 вопрос - 4 балла, 5 вопрос - 2 балла и 6 вопрос - 5 баллов.

1. Методы расчета свойств потоков растворов и парогазовых смесей по экспериментальным данным.
2. Основы и принципы выбора термодинамической системы моделирования.
3. Моделирование и построение графиков и диаграмм свойств потока в зависимости от термобарических условий.
4. Применение и реализация расчетов в системах автоматизированного проектирования.
5. Расчет кожухотрубчатых теплообменников.
6. Расчет кожухотрубчатых испарителей.
7. Расчет кожухотрубчатых конденсаторов.
8. Расчет воздушных теплообменников.
9. Расчет пластинчатых теплообменников.
10. Подбор составных частей теплообменной аппаратуры в зависимости от условий.
11. Стоимостные расчеты теплообменной аппаратуры.
12. Проектные расчеты ректификации.
13. Поверочные расчеты ректификации.
14. Проектные расчеты сепарирования.
15. Поверочные расчеты сепарирования.
16. Проектные расчеты простой перегонки.
17. Поверочные расчеты простой перегонки.
18. Моделирование и построение диаграмм tp -ху.
19. Расчет модуля ректификации *short*.
20. Расчет модуля ректификации *tower*.
21. Расчет модуля ректификации/абсорбции с учетом химической реакции *scds*.
22. Абсорбция с использованием пакетов расчета равновесной диссоциации электролитов.
23. Моделирование ректификации в динамике.

Вариант 1. После первой стадии получения 2,4-D через центробежный насос с КПД 0.97 поток фенола 500 кг/ч, п-хлорфенола 300 кг/ч и 2,4-дихлорфенола 100 кг/ч с температурой 100°C и давлением 1,6 бара попадает в теплообменник 1, где нагревается до 160°C перекрестным потоком 2,4-дихлорфенола. После этого, поток, проходя теплообменник 2, в котором нагревается до 200°C, поступает последовательно в 2 ректификационные колонны. В данных колоннах проходит разделение потока до индивидуальных веществ (фенол не менее 99,9% масс, ХФ не менее 99,8% масс., ДХФ не

менее 99,9%). Полученный чистый ДХФ, поступая в теплообменник 1, нагревает исходную смесь.

При решении задачи, следует учесть, что:

- Термодинамическая модель расчета равновесий UNIFAQ, а расчета энтальпии – Latent Heat;
- Потери давления в каждом т.о. порядка 0,3 бар, а по длине каждой из колонн – 0,1 бар;
- Питание в каждую колонну подается на центральную тарелку;
- Давление потока до насоса 1 бар.

Задание:

1. Начертите ТРху-диаграмму для трехкомпонентной системы фенол, ХФ, ДХФ при постоянном значении фенола = 0,2 мольн. %.
2. Найдите значение поверхностного натяжения смеси ХФ-ДХФ (80/20 мольн. %);
3. Рассчитайте описанную схему таким с минимально возможным числом тарелок в колоннах;
4. Замкните в рецикл поток ДХФ, тем самым повысив эксергетический КПД системы;
5. Рассчитайте диаметр колонны 1 с ситчатыми тарелками;
6. Выполните анализ параметрической чувствительности и изобразите зависимость температуры дистиллята из первой колонны от изменения давления в нагнетающем центробежном насосе при учете, что давление верха колонны 1 (Top Pressure) подчиняется зависимости: **давление верха колонны 1 (Top Pressure) = Выходное давление насоса (Outlet Pressure) +0,6 бара** (на потери в обоих теплообменниках). Пределы изменения выходного давления насоса от 0,6 бара (абс.) до 1 бара.

Вопрос № 1	Вопрос № 2	Вопрос № 3	Вопрос № 4	Вопрос № 5	Вопрос № 6	Итого
1	1	2	4	2	5	15

Раздел 4-6. Примеры вопросов к контрольной работе № 2. Максимальная оценка – 20 баллов. Контрольная работа содержит 3 вопроса: 1 вопрос – 10 баллов, 2 вопрос – 5 баллов и 3 вопрос - 5 баллов.

1. Виды расчетов химических реакторов.
2. Расчет стехиометрических и термодинамических реакторов
3. Расчет равновесных реакторов;
4. Расчет кинетических реакторов;
5. Динамические расчеты реакторов;
6. Расчет реакторов batch модуля.
7. Основы построения химико-технологических систем.
8. Эксергия;
9. Эксергетический КПД. Минимизация потерь.
10. Моделирование ХТС;
11. Использование приборов автоматизации при проектировании ХТС;
12. Оптимизация производства;
13. Анализ производства
14. Расчет стоимости материалов и реагентов для синтеза химических веществ.
15. Расчет стоимости выделения индивидуальных веществ из реакционной массы.
16. Расчет временных затрат.
17. Комплексный расчет себестоимости производства.

Вариант1. В термодинамической системе NRTL/Latent Heat в динамическом режиме

в реакторе с мешалкой объемом 2500 л проводится обменная реакция 629.17 кг изобутилового спирта с 384,4 кг сухого хлороводорода при температуре 100 °С и давлении 35 бар.

Уравнения кинетической реакции задается в виде формулы Visual Basic; единицы измерения: моли, минуты, л, кДж.

Энергия активации реакции получения третбутилхлорида: 36 кДж/моль, а изобутилхлорида 41 кДж/моль. Предэкспоненциальные множители: 43 и 42, соответственно.

Задания по модели:

1. Реализуйте технологическую схему этого процесса в хемкаде и покажите зависимость данного процесса во времени;

2. При успешном выполнении п.1, необходимо реализовать полупериодический режим проведения процесса путем введения в реактор после 160 ч реакции 0,0047 кг/ч смеси изобутанола и хлороводорода (1 к 1). Избыточный хлороводород и изобутилхлорид в этом случае будут уходить с газообразными продуктами реакции при сохранении давления, а избыточный изобутанол и третбутилхлорид через слив реактора с расходом 0,004 кг/ч.

3. Учитывая, что, выходя из реактора жидкий поток подается на ректификацию, начертите зависимость кол-ва моль третбутилхлорида во времени, выходящего с верха дистиляционной колонны (Тowr), при условии, что коэффициент выделения третбутилхлорида в дистиляте и изобутанола в кубе будет 0,95.

Вопрос № 1	Вопрос № 2	Вопрос № 3	Итого
10	5	5	20

8.3. Вопросы для итогового контроля освоения дисциплины (1 семестр – экзамен).

Экзамен по дисциплине «*Применение САПР для проектирования производств биологически активных веществ и химико-фармацевтических средств*» проводится в I семестре и включает контрольные вопросы по всем разделам учебной программы дисциплины. Билет для **экзамена** состоит из 3 вопросов, относящихся к указанным разделам. Ответы на вопросы **экзамена** оцениваются из максимальной оценки 40 баллов следующим образом: максимальное количество баллов за первый вопрос – 8 баллов, за второй – 20 баллов и за третий – 12 баллов.

8.3.1. Примеры контрольных вопросов для итогового контроля освоения дисциплины (1 семестр – экзамен).

Максимальное количество баллов за экзамен – 40 баллов

1. Современные системы автоматизированного проектирования в химической технологии, с базами данных.
2. Современные методы расчета свойств материальных потоков.
3. Методы расчета свойств потоков растворов и парогазовых смесей по экспериментальным данным.
4. Моделирование и построение графиков и диаграмм свойств потока в зависимости от термобарических условий.
5. Применение и реализация расчетов в системах автоматизированного проектирования.
6. Программные методы расчета и моделирования теплообменной аппаратуры.
7. Расчет кожухотрубчатых, воздушных и пластинчатых теплообменных аппаратов в программных пакетах ChemCAD и HYSYS.
8. Подбор составных частей теплообменной аппаратуры в зависимости от условий.

9. Поверочный и проектный расчет теплообменников без фазовых переходов.
10. Поверочный и проектный расчет испарителей.
11. Поверочный и проектный расчет конденсаторов.
12. Стоимостные расчеты теплообменных аппаратов.
13. Программные методы расчета и моделирования массообменной аппаратуры разделения материальных потоков.
14. Виды расчетов ректификационных колонн.
15. Моделирование и построение диаграмм ТР-ХУ.
16. Моделирование сепараторов.
17. Моделирование простой перегонки.
18. Расчет модуля ректификации Shor.
19. Расчет модуля ректификации Tower.
20. Расчет модуля ректификации/абсорбции с учетом химической реакции SCDS.
21. Абсорбция с использованием пакетов расчета равновесной диссоциации электролитов.
22. Моделирование ректификации в динамике.
23. Современные методы расчета химических реакторов и моделирования химических реакций.
24. Виды расчетов химических реакторов в системах автоматизированного проектирования.
25. Расчет стехиометрических реакторов.
26. Расчет термодинамических реакторов.
27. Расчет равновесных реакторов.
28. Расчет кинетических реакторов.
29. Модуль расчета Batch.
30. Химические реакторы в динамическом и стационарном режиме.
31. Современные методы моделирования химико-технологических систем.
32. Основы построения химико-технологических систем.
33. Комплексные подходы к расчету систем с замкнутым контуром рециркуляции.
34. Моделирование и использование средств автоматизации и контроля.
35. Анализ параметрической чувствительности химико-технологических систем.
36. Оптимизация химико-технологических систем.
37. Современные методы автоматизированного расчета себестоимости химического производства.
38. Расчет стоимости материалов и реагентов для синтеза химических веществ.
39. Расчет стоимости выделения индивидуальных веществ из реакционной массы.
40. Расчет временных затрат.
41. Комплексный расчет себестоимости производства.

Фонд оценочных средств приведен в виде отдельного документа, являющегося неотъемлемой частью основной образовательной программы.

8.4. Структура и примеры билетов для экзамена (I семестр).

Экзамен по дисциплине «*Применение САПР для проектирования производств биологически активных веществ и химико-фармацевтических средств*» проводится в I семестре и включает контрольные вопросы по всем разделам учебной программы дисциплины. Билет для *экзамена* состоит из 3 вопросов, относящихся к указанным

разделам. Ответы на вопросы **экзамена** оцениваются из максимальной оценки 40 баллов следующим образом: максимальное количество баллов за первый вопрос – 8 баллов, второй – 20 баллов, третий вопросы – 12 баллов.

Пример билета для **экзамена**:

«Утверждаю» зав. кафедрой ХТОС _____ С.В. Попков «__» _____ 20__ г.	Министерство образования и науки РФ
	Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева
	Кафедра химии и технологии органического синтеза
	18.04.01 – «Химическая технология» Магистерская программ «Химия и технология биологически активных веществ»
	«Применение САПР для проектирования производств биологически активных веществ и химико-фармацевтических средств»
Экзаменационный билет № 1 1. Рассчитать теплообменник для конденсации 150 кг/ч сухого насыщенного пара CO₂ под давлением $p_{абс}=6,0$ МПа. Жидкий CO₂ выходит из конденсатора под тем же давлением при температуре конденсации. Принимая разность температур CO₂ и воды на выходе из конденсатора 9 К, определить необходимый расход воды, если она поступает в конденсатор с температурой 10 °С. С помощью программного пакета Aspen: 1. рассчитать необходимую поверхность теплообмена, основываясь на стоимости готового теплообменника. 2. вывести чертеж рассчитанного теплообменника. 3. определить коэффициенты теплопередачи. 2. В изотермическом реакторе проточного типа объемом 6 м³ при температуре 200°C и давлении 0,5 бар (абс.) в паровой фазе происходит реакция окисления толуола кислородом воздуха с получением бензойной кислоты. Кинетические параметры процесса: $R_{xnRate001} = \text{Exp} (16.17-8970/(Temp+273))*C_{O_2}$ При следующих единицах задания кинетических данных: кДж, м³, грам*моли, килограммы, секунды). На основе исходных данных смоделировать и найти: 1. Найти конверсию исходного толуола в данных условиях при расходе толуола при времени удерживания паров толуола 20 ч; 2. Выполнить анализ параметрической чувствительности кол-ва прореагировавшего толуола от температуры; 3. Предложить и смоделировать технологическую схему процесса с выделением конечного продукта, максимально понизив тепловые потери (использовать рекуперацию энергии путем использования рецикла); При решении задачи следует нивелировать тепловые удары горячих потоков для оборудования. По возможности, реализовать рецикл непрореагировавших реагентов. Термодинамическая система NRTL 3. Вопрос по расчетно-графической работе	

9. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

9.1.Рекомендуемая литература

А. Основная литература

1. Зиятдинов Н.Н. Лаптева Т.В. Математическое моделирование Химико-технологических систем с использованием программы chemcad. Учебно-методическое пособие. -Казань: Казан. гос. технол. ун-т., 2008. — 160 с.
2. Гартман, Т. Н., Клушин Д. В. Основы компьютерного моделирования химико-технологических процессов : учебное пособие для вузов - М. : Академкнига, 2008. - 415с.

Б. Дополнительная литература

1. Перерва О. В., Гартман Т. Н. Компьютерное моделирование статических и динамических режимов работы ректификационных установок: практическое руководство для проектировщиков. — ДеЛи Плюс Москва, 2016. — С. 206.
2. Введение в информационные системы предприятий химической промышленности : учебное пособие / Т. Н. Гартман [и др.]. - М. : РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2011. - 103 с.

9.2. Рекомендуемые источники научно-технической информации

- учебные пособия по дисциплине;
- раздаточный материал к разделам лекционного курса и к практическим занятиям по дисциплине;
- электронные презентации к разделам лекционного курса;
- справочные материалы в печатном и электронном виде;
- кафедральные библиотеки электронных изданий.

Научно-технические журналы:

- Журнал «Агрохимия» ISSN 0002-1881
- Журнал «Химико-фармацевтический журнал» ISSN 0023-1134.

Ресурсы информационно–телекоммуникационной сети Интернет:

- <http://lib.muctr.ru/> - фонды учебной, учебно-методической, научной, периодической научно-технической литературы Информационно-библиотечного центра (ИБЦ) РХТУ им. Д. И. Менделеева;
- <https://muctr.ru/university/departments/htos/info/> - сайт кафедры химии и технологии органического синтеза

9.3. Средства обеспечения освоения дисциплины

Для реализации учебной программы подготовлены следующие средства обеспечения освоения дисциплины:

- компьютерные презентации интерактивных лекций – 16, (общее число слайдов – 486);

10. ПЕРЕЧЕНЬ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ В ОБРАЗОВАТЕЛЬНОМ ПРОЦЕССЕ

Информационную поддержку изучения дисциплины осуществляет Информационно-библиотечный центр (ИБЦ) РХТУ им. Д.И. Менделеева, который обеспечивает обучающихся основной учебной, учебно-методической и научной литературой, необходимой для организации образовательного процесса по дисциплине. Общий объем многоотраслевого фонда ИБЦ на 01.01.2024 составляет 1 559 436 экз.

Фонд ИБЦ располагает учебной, учебно-методической и научно-технической литературой в форме печатных и электронных изданий, а также включает официальные,

справочно-библиографические, специализированные отечественные и зарубежные периодические и информационные издания. ИБЦ обеспечивает доступ к профессиональным базам данных, информационным, справочным и поисковым системам.

Каждый обучающийся обеспечен свободным доступом из любой точки, в которой имеется доступ к сети Интернет и к электронно-библиотечной системе (ЭБС) Университета, которая содержит различные издания по основным изучаемым дисциплинам и сформирована по согласованию с правообладателями учебной и учебно-методической литературы.

Для более полного и оперативного справочно-библиографического и информационного обслуживания в ИБЦ реализована технология Электронной доставки документов.

Полный перечень электронных информационных ресурсов, используемых в процессе обучения, представлен в основной образовательной программе.

11. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

В соответствии с учебным планом занятия по дисциплине *«Применение САПР для проектирования производств биологически активных веществ и химико-фармацевтических средств»* проводятся в форме лекций, практических занятий, лабораторных занятий и самостоятельной работы обучающегося.

11.1. Оборудование, необходимое в образовательном процессе:

Лекционная учебная аудитория, оборудованная электронными средствами демонстрации (компьютер со средствами звуковоспроизведения, проектор, экран) и учебной мебелью.

Библиотека, имеющая рабочие места, оснащенные компьютерами с доступом к базам данных и выходом в Интернет.

11.2. Учебно-наглядные пособия:

Учебные пособия по дисциплине.

Раздаточный материал к разделам лекционного курса.

Раздаточный материал к практическим занятиям по дисциплине.

Электронные презентации к разделам лекционного курса.

Справочные материалы в печатном и электронном виде.

11.3. Компьютеры, информационно-телекоммуникационные сети, аппаратно-программные и аудиовизуальные средства:

Персональные компьютеры, укомплектованные проигрывателями CD и DVD, принтерами и программными средствами.

Проекторы и экраны.

Копировальные аппараты.

Локальная сеть с выходом в Интернет.

11.4. Печатные и электронные образовательные и информационные ресурсы:

Информационно-методические материалы: учебные пособия по дисциплине.

Электронные образовательные ресурсы: учебно-методические разработки в электронном виде; справочные материалы в печатном и электронном виде; кафедральная библиотека электронных изданий.

11.5. Перечень лицензионного программного обеспечения:

Полный перечень лицензионного программного обеспечения представлен в основной образовательной программе.

№ п.п.	Наименование программного продукта	Реквизиты договора поставки	Срок окончания действия лицензии
1.	WINDOWS 8.1 Professional Get Genuine	Контракт № 62-64ЭА/2013 от 02.12.2013	бессрочно
2.	Micosoft Office Standard 2013	Контракт № 62-64ЭА/2013 от 02.12.2013	бессрочная
3.	WINHOME 10 Russian OLV NL Each AcademicEdition	Контракт № 28-35ЭА/2020 от 26.05.2020	бессрочно
4.	Microsoft Office Standard 2019 В составе: • Word • Excel • Power Point • Outlook	Контракт №175- 262ЭА/2019 от 30.12.2019	12 месяцев (ежегодное продление подписки с правом перехода на обновлённую версию продукта)
5.	Kaspersky Endpoint Security для бизнеса – Стандартный Russian Edition.	Договор № 99-155ЭА-223/2024	12 месяцев (ежегодное продление подписки с правом перехода на обновлённую версию продукта)

12. ТРЕБОВАНИЯ К ОЦЕНКЕ КАЧЕСТВА ОСВОЕНИЯ ПРОГРАММЫ

Наименование разделов	Основные показатели оценки	Формы и методы контроля и оценки
Раздел 1. Современные методы расчета свойств материальных потоков.	<i>Знает:</i> Современные методы расчета свойств материальных потоков; основы работы с программным обеспечением САПР. <i>Умеет:</i> с помощью программ ChemCAD и HYSYS вычислить спектр свойств химических потоков любого состава для заданных термобарических условий; строить графические зависимости свойств потока от условий измерения. <i>Владеет:</i> навыками поиска и расчета нужных свойств для нужных потоков средствами САПР.	Оценка за контрольную работу №1 (1 семестр); Оценка за выполнение расчетно-графической работы (1 семестр); Оценка за экзамен (1 семестр)
Раздел 2. Программные методы расчета и моделирования теплообменной аппаратуры.	<i>Знает:</i> – общие методы расчета теплообменных аппаратов; – проектные и поверочные методы расчета кожухотрубчатых, пластинчатых и воздушных теплообменников; – применимость различных теплообменников для поставленных задач; – выбор материалов теплообменных устройств для поставленных задач проектирования. <i>Умеет:</i> – сделать поверочный и проектный расчет кожухотрубчатых, пластинчатых и воздушных теплообменников в соответствии с поставленной задачей проектирования средствами САПР. <i>Владеет:</i> – навыками использования САПР для решения задач по подбору и расчету теплообменного оборудования.	Оценка за контрольную работу №1 (1 семестр); Оценка за выполнение расчетно-графической работы (1 семестр); Оценка за экзамен (1 семестр)
Раздел 3. Программные методы расчета и моделирования массообменной аппаратуры разделения материальных потоков.	<i>Знает:</i> – общие методы расчета массообменных аппаратов; – проектные и поверочные методы расчета сепараторов, установок простой перегонки и ректификационных колонн; – применимость различных аппаратов разделения веществ на основе их летучести для поставленных задач;	Оценка за контрольную работу №1 (1 семестр); Оценка за выполнение расчетно-графической работы (1 семестр);

	– выбор материалов массообменных устройств для поставленных задач проектирования. <i>Умеет:</i> – сделать поверочный и проектный расчет сепараторов, установок простой перегонки и ректификационных колонн в соответствии с поставленной задачей проектирования средствами САПР. <i>Владеет:</i> – навыками использования САПР для решения задач по подбору и расчету массообменного оборудования для разделения веществ по их летучести.	Оценка за экзамен (1 семестр)
Раздел 4. Современные методы расчета химических реакторов и моделирования химических реакций.	<i>Знает:</i> – общие методы расчета реакционного оборудования; – проектные и поверочные методы расчета химических реакторов; – применимость различных видов реакторов для поставленных задач; – выбор материалов химических реакторов для поставленных задач проектирования. <i>Умеет:</i> – сделать поверочный и проектный расчет химических реакторов в соответствии с поставленной задачей проектирования средствами САПР. <i>Владеет:</i> – навыками использования САПР для решения задач по подбору и расчету массообменного оборудования для проведения химических реакций.	Оценка за контрольную работу №2 (1 семестр); Оценка за выполнение расчетно-графической работы (1 семестр); Оценка за экзамен (1 семестр)
Раздел 5. Современные методы моделирования химико-технологических систем в производствах БАВ.	<i>Знает:</i> – методы расчета ХТС средствами САПР; – методы оптимизации и анализа при проектировании ХТС. <i>Умеет:</i> – делать оптимизацию и анализ рассчитанной в САПР ХТС; – предложить решение по оптимизации ХТС. <i>Владеет:</i> – навыками использования САПР для решения задач по комплексному расчету ХТС и их оптимизации.	Оценка за контрольную работу №2 (1 семестр); Оценка за выполнение расчетно-графической работы (1 семестр); Оценка за экзамен (1 семестр)
Раздел 6. Современные методы	<i>Знает:</i> – общие принципы расчета себестоимости производства средствами	Оценка за контрольную работу №2 (1 семестр);

автоматизированного расчета себестоимости химического производства.	САПР. <i>Умеет:</i> – провести оценку себестоимости производства с помощью программы ChemProject <i>Владеет:</i> – навыками автоматизированного расчета себестоимости химического производства.	Оценка за выполнение расчетно-графической работы (1 семестр); Оценка за экзамен (1 семестр)

13. ОСОБЕННОСТИ ОРГАНИЗАЦИИ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО ПРОЦЕССА ДЛЯ ИНВАЛИДОВ И ЛИЦ С ОГРАНИЧЕННЫМИ ВОЗМОЖНОСТЯМИ ЗДОРОВЬЯ

Обучение инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья осуществляется в соответствии с:

– Порядком организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры (Приказ Министерства науки и высшего образования Российской Федерации от 06.04.2021 № 245);

– Положением о порядке организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева», принятым решением Ученого совета РХТУ им. Д.И. Менделеева от 28.12.2022, протокол № 5;

– Методическими рекомендациями по организации образовательного процесса для обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья в образовательных организациях высшего образования, в том числе оснащенности образовательного процесса (утверждены заместителем Министра образования и науки РФ А.А. Климовым от 08.04.2014 № АК-44/05вн).

**Дополнения и изменения к рабочей программе дисциплины
«Применение САПР для проектирования производств биологически
активных веществ и химико-фармацевтических средств»**

основной образовательной программы

Направление подготовки 18.04.01 – Химическая технология
Магистерская программа «Химия и технология биологически активных веществ»

Форма обучения: очная

Номер изменения/ дополнения	Содержание дополнения/изменения	Основание внесения изменения/дополнения
1.		протокол заседания Ученого совета №_____от «___»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «___»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «___»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «___»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «___»_____20__г.

**Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Российский химико-технологический университет
имени Д.И. Менделеева»**

«УТВЕРЖДЕНО»

на заседании Ученого совета

РХТУ им. Д.И. Менделеева

протокол № 1 от «29» августа 2024 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

**«Современные направления и методы получения биологически активных
веществ»**

Направление подготовки 18.04.01 Химическая технология
(Код и наименование направления подготовки)

**Магистерская программа – «Химия и технология биологически активных
веществ»**
(Наименование магистерской программы)

Квалификация «магистр»

Москва 2024

Программа составлена: к.х.н., доцентом кафедры химии и технологии органического синтеза С.Н. Мантровым;

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры химии и технологии органического синтеза

«26» апреля 2024 г., протокол №7

1. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ

Программа составлена в соответствии с требованиями Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования – магистратура по направлению подготовки **18.04.01 Химическая технология** (ФГОС ВО), рекомендациями Методической комиссии и накопленным опытом преподавания дисциплины кафедрой **Химии и технологии органического синтеза** РХТУ им. Д.И. Менделеева. Программа рассчитана на изучение дисциплины в течение двух семестров.

Дисциплина **«Современные направления и методы получения биологически активных веществ»** относится к дисциплинам по выбору части дисциплин учебного плана, формируемой участниками образовательных отношений и рассчитана на изучение во 2 и 3 семестрах обучения. Программа дисциплины предполагает, что обучающиеся имеют теоретическую и практическую подготовку в области органического синтеза, в частности в области химии и технологии органических веществ.

Цель дисциплины - ознакомление с современными направлениями и тенденциями в области методов получения биологически-активных соединений, повышение научной и методологической компетенций студента, необходимых для решения профессиональных задач, связанных с проведением научно-исследовательской работы.

Задачи дисциплины –

- изучить современные методы получения биологически активных веществ, тенденции развития и проблемы химии биологически активных веществ;
- освоить разработку схем синтеза биологически активных веществ с учетом принципов стратегии органического синтеза;
- сформировать навыки владения методами анализа и синтеза целевых биологически активных веществ;

Дисциплина **«Современные направления и методы получения биологически активных веществ»** преподается во 2 и 3 семестрах. Контроль успеваемости студентов ведется по принятой в университете рейтинговой системе.

2. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Изучение дисциплины направлено на приобретение следующих **компетенций и индикаторов их достижения:**

Профессиональные компетенции и индикаторы их достижения:

Задача профессиональной деятельности	Объект или область знания	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК	Основание (профессиональный стандарт, анализ опыта) Обобщенные трудовые функции
Научно-исследовательский тип задач профессиональной деятельности				
Выполнение фундаментальных и прикладных работ поискового, теоретического и экспериментального характера с целью определения технических характеристик новой техники, а также комплекса работ по разработке технологической документации.	Химическое, химико-технологическое производство Сквозные виды профессиональной деятельности в промышленности (в сфере организации и проведения научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ в области химического и химико-технологического производства).	ПК-2. Способен к поиску, обработке, анализу и систематизации научно-технической информации по теме исследования, выбору методик и средств решения задачи	ПК-2.1. Знает алгоритм поиска, оценки и анализа научно-технической информации.	Профессиональный стандарт 40.011 «Специалист по научно-исследовательским и опытно-конструкторским разработкам», утвержденный приказом Министерства труда и социальной защиты Российской Федерации от 04.03.2014 № 121 н, Обобщенная трудовая функция С. Проведение научно-исследовательских и опытно-конструкторских разработок. С /01.6. Осуществление научного руководства проведением исследований по отдельным задачам (уровень квалификации – 6).
			ПК-2.2. Умеет обобщать и систематизировать научно-техническую информацию.	
			ПК-2.3. Владеет навыками соотнесения результатов собственной научной работы с отечественным и зарубежным опытом по тематике исследования.	

Задача профессиональной деятельности	Объект или область знания	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК	Основание (профессиональный стандарт, анализ опыта) Обобщенные трудовые функции
		ПК-3. Способен применять современные приборы и методы исследования, планировать, организовывать и проводить эксперименты и испытания, корректно обрабатывать и анализировать полученные результаты.	ПК-3.1. Знает экспериментальные методы и их приборное и аппаратное оформление для исследования веществ и материалов.	
		ПК-4. Способен проводить поисковые исследования инновационных технологических процессов в области биологически активных веществ.	ПК-4.2. Умеет производить поисковые работы для разработки новых методов получения и анализа биологически активных веществ.	

Задача профессиональной деятельности	Объект или область знания	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК	Основание (профессиональный стандарт, анализ опыта) Обобщенные трудовые функции
		ПК-5. Способен осуществлять самостоятельные научные исследования в области химии и технологии биологически активных веществ.	ПК-5.1. Знает методы получения, особенности производства, свойства и механизмы действия биологически активных веществ различных классов.	
			ПК-5.3. Умеет использовать теоретические знания по химии и технологии биологически активных веществ для решения конкретных задач научно-исследовательской деятельности.	

В результате изучения дисциплины студент магистратуры должен:

Знать:

- современные тенденции развития и проблемы химии биологически активных веществ;
- теоретические основы современных методов получения биологически активных веществ;
- способы разделения и анализа пространственных изомеров;
- примеры каталитических процессов в химии биологически активных веществ;
- примеры стереонаправленного синтеза биологически активных веществ.
- методы синтеза и применения меченных изотопами биологически активных веществ,
- принципы создания супрамолекулярных ансамблей,

Уметь:

- разработать схемы синтеза биологически активных веществ с учетом принципов стратегии органического синтеза;
- анализировать альтернативные методы синтеза конкретных веществ с учетом доступности реагентов, стадийности, селективности процесса;

Владеть:

- методами критического анализа способов синтеза биологически активных веществ;
- методами стереонаправленного синтеза целевых биологически активных веществ;
- методами сборки супрамолекулярных структур с заданными свойствами.

3. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Вид учебной работы	Всего		Семестр			
			1 семестр		2 семестр	
	ЗЕ	Акад. ч.	ЗЕ	Акад. ч.	ЗЕ	Акад. ч.
Общая трудоемкость дисциплины	6	216	2	72	4	144
Контактная работа – аудиторные занятия:	1,89	68	0,95	34	0,95	34
в том числе в форме практической подготовки	0,95	34	0,47	17	0,47	17
Лекции	0,95	34	0,47	17	0,47	17
Практические занятия	0,95	34	0,47	17	0,47	17
в том числе в форме практической подготовки	0,95	34	0,47	17	0,47	17
Самостоятельная работа	3,11	112	1,05	38	2,05	74
Контактная самостоятельная работа	3,11	0,2	1,05	0,2	2,05	-
Самостоятельное изучение разделов дисциплины		111,8		37,8		74
Виды контроля:						
Экзамен	1	36	-	-	1	36
Контактная работа – промежуточная аттестация	1	0,3	-	-	1	0,3
Подготовка к экзамену		35,7		-		35,7

Вид итогового контроля:			Зачет		Экзамен	

Вид учебной работы	Всего		Семестр			
			1 семестр		2 семестр	
	ЗЕ	Астр. ч.	ЗЕ	Астр. ч.	ЗЕ	Астр. ч.
Общая трудоемкость дисциплины	6	162	2	54	4	108
Контактная работа – аудиторные занятия:	1,89	51	0,95	25,5	0,95	25,5
Лекции	0,945	25,5	0,47	12,75	0,47	12,75
Практические занятия	0,945	25,5	0,47	12,75	0,47	12,75
в том числе в форме практической подготовки	0,945	25,5	0,47	12,75	0,47	12,75
Самостоятельная работа	3,11	84	1,05	28,5	2,05	55,5
Контактная самостоятельная работа	3,11	0,15	1,05	0,15	2,05	-
Самостоятельное изучение разделов дисциплины		83,85		28,35		55,5
Виды контроля:						
Экзамен	1	27	-	-	1	27
Контактная работа – промежуточная аттестация	1	0,23	-	-	1	0,23
Подготовка к экзамену.		26,77		-		26,77
Вид итогового контроля:			Зачет		Экзамен	

4. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

4.1. Разделы дисциплины и виды занятий

№ п/п	Раздел дисциплины	Академ. часов								
		Всего	в т.ч. в форме пр. подг.	Лек- ции	в т.ч. в форме пр. подг.	Прак. зан.	в т.ч. в форме пр. подг.	Лаб. работ ы	в т.ч. в форме пр. подг.	Сам. работа
1.	Введение	4	1	1	-	1	1	-	-	2
2.	Раздел 1. Планирование синтеза сложных органических молекул с применением ретросинтеза	26	4	4	-	4	4	-	-	18
2.1	Ретросинтез. Основные понятия. Правила и методы построения ретросинтетического дерева.	13	2	2	-	2	2	-	-	9
2.2	Ретроны. Типы и применение ретронов при осуществлении ретросинтеза	13	2	2	-	2	2	-	-	9
3.	Раздел 2. Стереоселективный синтез БАВ	42	12	12	-	12	12	-	-	18
3.1	Пространственная изомерия. Номенклатура и способы обозначения. Методы анализа и разделения пространственных изомеров	9	1	2	-	1	1	-	-	6
3.2	Методы синтеза чистых энантио- и диастереомеров с применением хиральных реагентов и хиральных вспомогательных веществ	19	6	7	-	6	6	-	-	6
3.3	Методы синтеза чистых энантио- и диастереомеров с применением хиральных катализаторов.	14	5	3	-	5	5	-	-	6
4.	Раздел 3. Основы супрамолекулярной химии. Применение супрамолекулярных систем в технологии биологически-активных веществ	58,5	12	9,5	-	12	12	-	-	37

4.1	Предмет супрамолекулярной химии. Основные понятия и определения	19	5	4	-	5	5	-	-	10
4.2	Супрамолекулярные ансамбли с заряженными частицами. «Хозяева» катионов и анионов	27	5	4	-	5	5	-	-	18
4.3	«Хозяева» нейтральных молекул	12,5	2	1,5	-	2	2	-	-	9
5.	Раздел 4. Методы синтеза и применение органических соединений, меченых изотопами	49,5	5	7,5	-	5	5	-	-	37
5.1	Номенклатура соединений, меченных изотопами. Методы синтеза биологически-активных соединений, меченных изотопами	49,5	5	7,5	-	5	5	-	-	37
	ИТОГО:	180	34	34	-	34	34	-	-	112
	Экзамен	36								
	ИТОГО	216								

4.2. Содержание разделов дисциплины

Введение. Описание основных разделов курса. Структура курса и правила рейтинговой системы. Современные проблемы и тенденции в химии биологически активных веществ. Терминология и основные понятия.

Раздел 1. Планирование синтеза сложных органических молекул с применением ретроанализа. Планирование органического синтеза. Ретроанализ. Основные понятия ретросинтетического анализа. Трансформы и их основные типы. Синтоны. Соответствие синтонов и реагентов. Ретроны частичные и полные. Различные стратегии ретроанализа. Стратегии, базирующиеся на трансформах, на ретронах, на функциональных группах; топологические и стереохимические стратегии. Бифункциональные ретроны. Ретроны функциональных групп. Применение ретроанализа на примерах синтеза БАВ.

Раздел 2. Стереоселективный синтез БАВ. Пространственная изомерия. Энантиомеры и диастереомеры. Способы изображения пространственного строения молекулы: клиновидная проекция, проекции Ньюмена и Фишера. Относительная и абсолютная конфигурация. Номенклатура пространственных изомеров. Методы анализа пространственных изомеров. Способы определения энантиомерной чистоты с помощью различных методов (оптические методы, хроматография, спектроскопия ЯМР). Методы расщепления рацематов для получения чистых энантиомеров: метод Пастера, разделение через диастереомерные соединения (кристаллизация, хроматография), хроматография на хиральных носителях, химические и ферментативные методы. Методы синтеза чистых энантио- и диастереомеров. Реакции, не затрагивающие хиральный центр и реакции, приводящие к обращению конфигурации. Стереоселективный синтез, исходящий из энантиомерно чистого соединения и основанный на асимметрической индукции. Модели Циммермана-Трэкслера, Крама и Фелкина-Ана. Модель хелатирования по Краму. Хиральные реагенты восстановления кетонов на основе гидридов алюминия и бора. Асимметрическое аллилирование. Примеры энантиоселективных реакций с участием вспомогательных хиральных реагентов. Вспомогательные реагенты Эванса, Эндерса-Кори, Оппольцера, Щёлкопфа. Вспомогательные хиральные реагенты на основе (-)-8-фенилмента, амидов сульфеновых кислот. Принципы, лежащие в основе асимметрического катализа. Оптически-активные лиганды, используемые в катализаторах, содержащие хиральные атомы углерода или фосфора. Методы их получения и применение. Стереоселективное каталитическое гидрирование алкенов, спиртов, азометинов. Катализаторы Нойори и Ноулса. Каталитическое гидрирование кетонов методом Кори-Бакши-Шибата (Ицуно-Кори). Энантиоселективное эпоксидование олефинов. Катализаторы Шарплеса. Катализаторы окисления олефинов на основе комплексов марганца. Энантиоселективное эпоксидование по методу Ши. Асимметрическое дигидроокисливание олефинов под действием комплексов осмия. Асимметрический катализ присоединения металлоорганических соединений по карбонилу кетонов. Примеры энантиоселективных реакций с участием ферментов. Энантиоселективный органокатализ. Примеры реакций с участием органических катализаторов на основе оптически-активных оснований и кислот.

Раздел 3. Основы супрамолекулярной химии. Применение супрамолекулярных систем в технологии биологически-активных веществ. Предмет супрамолекулярной химии. Основные понятия. Варианты нековалентных взаимодействия гость-хозяин. Клатраты и кавитаты. Эффекты, обуславливающие прочность связывания молекул «гость-хозяин». Макроциклический и хелатный эффекты. Взаимосвязь. Эффект предорганизации «хозяина». Количественные характеристики, определяющие сродство и селективность супрамолекулярного связывания «гостя» с «хозяином». Межмолекулярные взаимодействия и их природа: электростатические силы, ион-дипольные взаимодействия, водородная связь, стэкинг-взаимодействие, ван-дер-ваальсовы силы. Самосборка,

темплатный синтез. Основные типы супрамолекулярных ансамблей и типичные субстраты. Примеры супрамолекулярных ансамблей. «Хозяева» катионов. Поданды, краун-эфиры, криптанды, лариат-эфиры, сферанды, каликс-арены. «Хозяева» анионов. Макроциклы на основе солей аммония и гуанидиния, металлоценов. Нейтральные «хозяины» анионов, содержащие амидные и сульфамидные связи. Антикراуны. Биологическая активность и применение «хозяев» ионов. Ионофоры. «Хозяева» нейтральных молекул. Циклодекстрины, кукурбитурилы, карциранды, циклофаны.

Раздел 4. Методы синтеза и применение органических соединений, меченных изотопами. Номенклатура соединений, меченных изотопами. Методы синтеза и анализа биологически-активных соединений, меченных изотопами. Исходные вещества для синтеза соединений, меченных изотопами углерода, водорода или азота. Реакции, используемые для введения изотопов в заданное положение структуры. Применение соединений, меченных изотопами в химии биологически-активных веществ и медицине.

5. СООТВЕТСТВИЕ СОДЕРЖАНИЯ ТРЕБОВАНИЯМ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

№	В результате освоения дисциплины студент должен:	Раздел 1	Раздел 2	Раздел 3	Раздел 4
	Знать:				
1	– современные тенденции развития и проблемы химии биологически активных веществ;	+	+	+	+
2	– теоретические основы современных методов получения биологически активных веществ;	+	+	+	+
3	– способы разделения и анализа пространственных изомеров;		+		
4	– примеры каталитических процессов в химии биологически активных веществ;	+	+	+	+
5	– примеры стереонаправленного синтеза биологически активных веществ;		+		
6	– методы синтеза и применения меченных изотопами биологически активных веществ;				+
7	– принципы создания супрамолекулярных ансамблей;			+	
	Уметь:				
8	– разработать схемы синтеза биологически активных веществ с учетом принципов стратегии органического синтеза;	+	+	+	+
9	– анализировать альтернативные методы синтеза конкретных веществ с учетом доступности реагентов, стадийности, селективности процесса;	+	+	+	+
	Владеть:				
10	– методами критического анализа способов синтеза биологически активных веществ;	+	+	+	+
11	– методами стереонаправленного синтеза целевых биологически активных веществ;		+		
12	– методами сборки супрамолекулярных структур с заданными свойствами.			+	
В результате освоения дисциплины студент должен приобрести следующие профессиональные компетенции и индикаторы их достижения:					
	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК			
13	ПК-2. Способен к поиску, обработке, анализу и систематизации научно-технической информации по теме исследования, выбору методик и средств решения задачи.	ПК-2.1. Знает алгоритм поиска, оценки и анализа научно-технической информации.	+	+	+
14		ПК-2.2. Умеет обобщать и систематизировать научно-техническую информацию.			

15		ПК-2.3. Владеет навыками соотнесения результатов собственной научной работы с отечественным и зарубежным опытом по тематике исследования.	+	+	+	+
16	ПК-3. Способен применять современные приборы и методы исследования, планировать, организовывать и проводить эксперименты и испытания, корректно обрабатывать и анализировать полученные результаты.	ПК-3.1. Знает экспериментальные методы и их приборное и аппаратное оформление для исследования веществ и материалов.	+	+	+	+
17	ПК-4. Способен проводить поисковые исследования инновационных технологических процессов в области биологически активных веществ.	ПК-4.2. Умеет производить поисковые работы для разработки новых методов получения и анализа биологически активных веществ.	+	+	+	+
18	ПК-5. Способен осуществлять самостоятельные научные исследования в области химии и технологии биологически активных веществ.	ПК-5.1. Знает методы получения, особенности производства, свойства и механизмы действия биологически активных веществ различных классов.	+	+	+	+
19		ПК-5.3. Умеет использовать теоретические знания по химии и технологии биологически активных веществ для решения конкретных задач научно-исследовательской деятельности.	+	+	+	+

6. ПРАКТИЧЕСКИЕ И ЛАБОРАТОРНЫЕ ЗАНЯТИЯ

6.1. Практические занятия

Примерные темы практических занятий по дисциплине.

№ п/п	№ раздела дисциплины	Темы практических занятий	Количество акад. часов
1	1	Современные проблемы и тенденции в химии биологически активных веществ, терминология и основные понятия.	1
2	1	Планирование органического синтеза.	1
3		Синтоны.	1
4		Ретроны частичные и полные.	2
5	2	Пространственная изомерия. Энантиомеры и диастереомеры.	1
6		Методы расщепления рацематов для получения чистых энантиомеров.	1
7		Методы синтеза чистых энантио- и диастереомеров.	6
8		Ассиметрическое аллилирование	2
9		Энантиоселективный органокатализ.	2
10	3	Предмет супрамолекулярной химии. Основные понятия.	5
11		Межмолекулярные взаимодействия и их природа.	5
12		Основные типы супрамолекулярных ансамблей и типичные субстраты.	1
13		Циклодекстрины, кукурбитурилы, карциранды, циклофаны.	1
14	4	Методы синтеза и анализа биологически-активных соединений, меченных изотопами.	2,5
15		Реакции, используемые для введения изотопов в заданное положение структуры.	2,5
Итого:			34

6.2. Лабораторные занятия

Выполнение лабораторного практикума учебным планом дисциплины *«Современные направления и методы получения биологически активных веществ»* не предусмотрено.

7. САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА

Самостоятельная работа проводится с целью углубления знаний по дисциплине и предусматривает:

- ознакомление и проработку рекомендованной литературы, работу с электронно-библиотечными системами, включая переводы публикаций из научных журналов, цитируемых в базах Scopus, Web of Science, Chemical Abstracts, РИНЦ;
- решение индивидуальных домашних заданий;
- подготовку к выполнению контрольных работ по материалу лекционного курса;

- написание реферата;
- подготовку к сдаче **зачета** (2 семестр) и **экзамена** (3 семестр) по курсу.

Планирование времени на самостоятельную работу, необходимого на изучение дисциплины, студентам лучше всего осуществлять на весь период изучения, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала. Материал, законспектированный на лекциях, необходимо регулярно дополнять сведениями из литературных источников, представленных в учебной программе. При работе с указанными источниками рекомендуется составлять краткий конспект материала, с обязательным фиксированием библиографических данных источника.

8. ПРИМЕРЫ ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ КОНТРОЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Совокупная оценка по дисциплине складывается из оценок за выполнение индивидуальных домашних заданий (максимальная оценка 100 баллов), реферативно-аналитической работы (максимальная оценка 20 баллов), контрольных работ (максимальная оценка 40 баллов) и итогового контроля в форме **экзамена** (максимальная оценка 40 баллов).

8.1. Примерная тематика реферативно-аналитической работы.

Для текущего контроля предусмотрено написание реферата (20 баллов).

1. *Биологически-активные ионофоры. Синтез и применение*
2. *Синтез и применение антикраунов*

8.2. Примеры контрольных вопросов для текущего контроля освоения дисциплины.

Для текущего контроля предусмотрено 7 индивидуальных домашних заданий и 2 контрольных работы. Максимальная оценка за индивидуальные домашние задания №1-7 (2 семестр) составляет 100 баллов по 10-15 баллов за каждую. Максимальная оценка за контрольные работы №1 и №2 (III семестр) составляет 40 баллов, по 20 баллов за каждую работу.

Раздел 1.

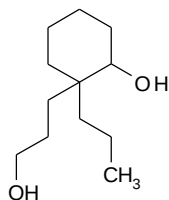
1. Основные понятия ретросинтетического анализа.
2. Трансформы и их основные типы.

Раздел 1. Ретросинтез. Трансформы и синтоны. Примеры вопросов к индивидуальному домашнему заданию № 1. Максимальная оценка – 15 баллов. Индивидуальное домашнее задание содержит 3 вопроса: 1 вопрос – 4 балла, 2 вопрос – 6 баллов и 3 вопрос - 5 баллов.

Индивидуальное домашнее задание №1

Вариант 1. Для вещества, указанного на рис, необходимо представить схему синтеза. Для этого необходимо:

1. Изобразить «дерево» ретросинтеза и отметить на нем применяемые трансформы и синтоны.
2. Используя полученное «дерево» выбрать подходящий вариант синтеза, определив доступность эквивалентов синтонов, используемых в данном синтезе. Наличие эквивалента-реактива определяется по каталогу <http://www.sigmaaldrich.com>. При этом его цена не должна превышать 200 руб/г.
3. Представить путь синтеза с примерными условиями проведения.



Вопрос №1	Вопрос №2	Вопрос №3	Итого
4	6	5	15

Раздел 1. Стратегии ретроанализа. Ретроны. Примеры вопросов к индивидуальному домашнему заданию № 2. Максимальная оценка – 15 баллов. Индивидуальное домашнее задание содержит 3 вопроса, 1 вопрос – 8 балла, 2 вопрос – 3 баллов и 3 вопрос - 4 баллов.

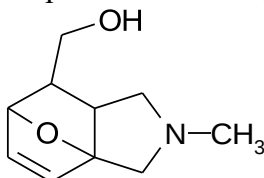
Индивидуальное домашнее задание №2

Вариант 1. Для вещества, указанного на рис, необходимо представить схему синтеза. Для этого необходимо:

1. . Используя стратегию, базирующуюся на трансформах, осуществить ретроанализ соединения, изображенного на рисунке. В процессе ретроанализа использовать «мощные реакции».

2. Отметить в работе два любых, использованных ретрона.

3. По результатам ретроанализа предложить схему синтеза вещества.



Вопрос №1	Вопрос №2	Вопрос №3	Итого
8	3	4	15

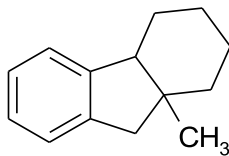
Раздел 1. Ретроны циклов. Примеры вопросов к индивидуальному домашнему заданию № 3. Максимальная оценка – 15 баллов. Индивидуальное домашнее задание содержит 2 вопроса, 1 вопрос – 8 балла, 2 вопрос – 7 баллов.

Индивидуальное домашнее задание №3

Вариант 1.

1. Используя ретроны пятичленных и/или шестичленных циклов, проведите ретроанализ, для представленного на рисунке, вещества.

2. На основе ретроанализа предложите две различные схемы синтеза целевой структуры из соединений, продающихся в <http://www.sigmaaldrich.com>.



Вопрос №1	Вопрос №2	Итого
8	7	15

Раздел 2.

1. Пространственная изомерия. Энантиомеры и диастереомеры. Номенклатура пространственных изомеров.

2. Способы изображения пространственного строения молекулы: клиновидная проекция, проекции Ньюмена и Фишера.

Раздел 2. Номенклатура и изображение пространственных изомеров. Примеры вопросов к индивидуальному домашнему заданию № 4. Максимальная оценка – 10 баллов, содержит 5 вопроса, по 2 баллов за вопрос.

Индивидуальное домашнее задание №4

Вариант 1.

1. Исходя из названия вещества – (4R,6S)-6-Бромокт-1-ен-4-ол, изобразите его проекционную формулу Фишера.
2. Нарисуйте структурную формулу этого соединения, обозначая взаимное расположение функциональных групп с помощью «летающих клиньев».
3. Изобразите проекционные формулы для одного энантиомера и одного диастереомера данного соединения.
4. Нарисуйте структурные формулы этих изомеров, обозначая взаимное расположение функциональных групп с помощью «летающих клиньев».
5. Дайте название этим изомерам.

Вопрос №1	Вопрос №2	Вопрос №3	Вопрос №4	Вопрос №5	Итого
2	2	2	2	2	10

Раздел 2. Синтез одного стереоизомера из оптически-чистого исходного вещества. Примеры вопросов к индивидуальному домашнему заданию № 5. Максимальная оценка – 15 баллов. Индивидуальное домашнее задание содержит 2 вопроса, 1 вопрос – 5 балла, 2 вопрос – 10 баллов.

Индивидуальное домашнее задание №5

Вариант 1.

1. Исходя из названия - 2-((S)-4-Метилпиперазин-2-ил)-этиламин, нарисуйте структурную формулу соединения, обозначив взаимное расположение функциональных групп с помощью «летающих клиньев».
2. Предложите синтез целевой структуры, используя доступные оптически-активные соединения, содержащие необходимый хиральный центр. Доступность определяется наличием и стоимостью в каталоге Sigma-Aldrich (менее 700 руб за грамм). Синтез не должен приводить к образованию рацематов, то есть должна сохраняться энантиомерная чистота вещества. Запрещается применять оптически-активные катализаторы и вспомогательные реагенты, приводящие к образованию новых хиральных центров. Нельзя использовать реакции, основанные на индукции

Вопрос №1	Вопрос №2	Итого
5	10	15

Раздел 2. Ассиметрическая индукция. Примеры вопросов к индивидуальному домашнему заданию № 6. Максимальная оценка – 15 баллов. Индивидуальное домашнее задание содержит 3 вопроса, по 5 баллов за вопрос.

Индивидуальное домашнее задание №6

Вариант 1.

1. Исходя из названия, нарисуйте структурные формулы (R)-3-Хлоробутан-2-она (вещество А) и (3S,4S)-3-Амино-4-имидазол-1-ил-3-метилпентановой кислоты (вещество Б).
2. Предложите синтез целевой структуры Б, применив в качестве исходного оптически-активное соединение А. Для синтеза можно использовать методы ассиметрической индукции 1.2 и 1.3, а также реакции, затрагивающие хиральный центр, но не приводящие к нарушению оптической чистоты продуктов или полупродуктов синтеза. Запрещается применять синтез, основанный на применении вспомогательных оптически-активных веществ и хиральных катализаторов.

3. Для стадий, в которых за счет ассиметрической индукции образуется оптически-активный изомер, применить и изобразить соответствующую модель и показать, что образуется именно этот изомер.

Вопрос №1	Вопрос №2	Вопрос №3	Итого
5	5	5	15

Раздел 2. Вспомогательные хиральные реагенты. Примеры вопросов к индивидуальному домашнему заданию № 7. Максимальная оценка – 15 баллов. Контрольная работа содержит 3 вопроса, по 5 баллов за вопрос.

Индивидуальное домашнее задание №7

Вариант 1.

1. Исходя из названия, нарисуйте структурные формулы пропионовой кислоты (вещество А) и (2R,5S)-2-Амино-5-метилгександиол-1,6 (вещество Б).

2. Предложите синтез целевой структуры Б, применив в качестве исходного соединения А. Для синтеза можно использовать любые ахиральные вещества и оптически-активные вспомогательные реагенты.

3. Для стадий, в которых образуется оптически-активный изомер применить и изобразить соответствующую модель и показать, что образуется именно этот изомер.

Вопрос №1	Вопрос №2	Вопрос №3	Итого
5	5	5	15

Раздел 2. Ассиметрический катализ. Примеры вопросов к контрольной работе № 1. Максимальная оценка – 20 баллов. Контрольная работа содержит 2 вопроса, по 10 баллов за вопрос.

Пример билет к контрольной работе №1

Вариант 1.

1. Для двух соединений: (S)-4-(4-метоксибензил)-оксазолидин-2-он и (S)-1-фенилгексан-3-ол, нарисовать структурную формулу с учетом взаимного расположения заместителей.

2. Предложить синтез данных структур, в первом случае в качестве одного из реагентов использовать глицин, во втором – бензол. Остальные реагенты не должны содержать хиральных атомов. На стадии получения оптически-чистого целевого изомера использовать только методы ассиметрического катализа.

Вопрос №1	Вопрос №2	Итого
10	10	20

Раздел 3. Основы супрамолекулярной химии. Применение супрамолекулярных систем в технологии биологически-активных веществ.

1. Предмет и основные понятия супрамолекулярной химии.

2. Типы межмолекулярных взаимодействий.

Раздел 4. Синтез соединений, меченых изотопами. Примеры вопросов к контрольной работе № 2. Максимальная оценка – 20 баллов. Контрольная работа содержит 2 вопроса, по 10 баллов за вопрос.

1. Номенклатура соединений, меченых изотопами.

2. Методы синтеза соединений, меченых изотопами.

Пример билет к контрольной работе №2

Вариант 1.

1. Используя в качестве источника изотопа ^{13}C [^{13}C] углекислый газ, предложите синтез 2-метил[6- ^{13}C] адипиновой кислоты. Для синтеза целевого продукта могут быть применены любые реагенты, имеющие природный состав изотопов.

2. Используя в качестве источника изотопа ^2H тяжелую воду, LiAlD_4 или D_2 , а также, применяя любые неорганические и вспомогательные органические реагенты, предложите схему синтеза $[\text{}^2\text{H}_2]$ метилбензола из толуола.

Вопрос №1	Вопрос №2	Итого
10	10	20

8.3 Вопросы для итогового контроля освоения дисциплины (3 семестр – экзамен).

Максимальное количество баллов за экзамен – 40 баллов. Экзаменационный билет содержит 2 вопроса.

1 вопрос – 20 баллов, вопрос 2 – 20 баллов.

8.3.1. Примеры контрольных вопросов для итогового контроля освоения дисциплины (3 семестр – экзамен).

Максимальное количество баллов за экзамен – 40 баллов.

Экзаменационный билет содержит 2 вопроса. 1 вопрос – 20 баллов, вопрос 2 – 20 баллов.

1. Ретросинтез. Основные понятия и допущения. Трансформ, ретрон, синтон. Примеры. Принципы подхода к планированию синтеза.

2. Виды трансформов. Правила выбора трансформов. Типы стратегий в ретросинтезе. Примеры.

8.4. Структура и примеры билетов для экзамена (III семестр).

Экзамен по дисциплине «Современные направления и методы получения биологически активных веществ» проводится в III семестре и включает контрольные вопросы по разделам 1-5 учебной программы дисциплины. Билет для экзамена состоит из 2 вопросов, относящихся к указанным разделам. Ответы на вопросы экзамена оцениваются из максимальной оценки 40 баллов следующим образом: максимальное количество баллов за первый вопрос – 20 баллов, второй – 20 баллов.

Пример билета для экзамена:

«Утверждаю» зав. кафедрой ХТОС _____ С.В. Попков «__» _____ 20__ г.	Министерство образования и науки РФ
	Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева
	Кафедра химии и технологии органического синтеза
	18.04.01 – «Химическая технология» Магистерская программа «Химия и технология биологически активных веществ»
	«Современные направления и методы получения биологически активных веществ»
Экзаменационный билет № 1 1. Виды трансформов. Правила выбора трансформов. Типы стратегий в ретросинтезе. Примеры. 2. Хиральные реагенты, применяемые в асимметрическом синтезе. Отличие от вспомогательных реагентов и асимметрических катализаторов. Хиральные восстановители на основе гидридов алюминия и боранов. Механизм индукции.	

9. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

9.1. Рекомендуемая литература

А. Основная литература

1. Травень В. Ф. Органическая химия: учебник для вузов; в 2 т. / В. Ф. Травень. - М.: БИНОМ Лаборатория знаний, 2015. — ISBN 978-5-9963-2938-0
2. Основы современного органического синтеза: учебное пособие. В. А. Смит, А. Д. Дильман. - 2-е изд. (эл.). - М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2012. - 750 с.
3. Кочетков К.А., Калистратова А.В. Региоселективный синтез биологически активных веществ: учебное пособие - М.: Издательство РХТУ, 2017.

Б. Дополнительная литература

1. Ли Дж. Именные реакции. Механизмы органических реакций. – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2006, 456 с.
2. Сайкс П. Механизмы реакций в органической химии. – М.: "Химия", 1991.
3. Бакстон Ш., Робертс С. Введение в стереохимию органических соединений. М.: Мир, 2005. 311 с. 4
4. Лен Ж.-М. Супрамолекулярная химия. Концепции и перспективы. Новосибирск: Наука, 1998. 333 с.
5. Сид Дж. В., Этвуд Дж. Л. Супрамолекулярная химия. □ М.: ИКЦ «Академкнига», 2007. Т. 1-2. – 895 с.
6. Ласло П. Логика органического синтеза: в 2-х томах: Пер. с франц. Т. 2 — М.: Мир, 1998. — 200 с.
7. Илиел Э., Вайлен С., Дойл М. Основы органической стереохимии. Издательство: Бином. Лаборатория знаний, 2007 г. 704 с. 5
8. Ногради М. Стереоселективный синтез М.: "МИР", 1989. 408 с.
9. Смит М. Органическая химия Марча. Реакции, механизмы, строение: в 4-х томах: пер. с англ. под ред. М. А. Юровской. — М.: Лаборатория знаний, 2022. — 2038 с. — ISBN 978-5-00101-872-8. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/266447> (дата обращения: 26.03.2022). — Режим доступа: для авториз. пользователей.
10. Граник В.Г. "Основы медицинской химии", Вузовская книга, 2001 – 371 с.

9.2. Рекомендуемые источники научно-технической информации

- электронные презентации к разделам лекционного курса, графики и таблицы, иллюстрирующие лекционный материал
- раздаточный материал к разделам лекционного курса.

Научно-технические журналы:

- Журнал «Химико-фармацевтический журнал» ISSN 0023-1134
- Журнал «Chemosensors» ISSN 2227-9040

9.3. Средства обеспечения освоения дисциплины

Для реализации учебной программы с использованием электронного обучения (ЭО) и дистанционных образовательных технологий (ДОТ) применяются следующие образовательные технологии и средства обеспечения дисциплины:

- ЕИОС РХТУ им. Д.И. Менделеева;
- платформы для проведения онлайн конференций (Zoom, Skype и др.);
- сервисы по доставки e-mail сообщений.

Для проведения промежуточных и итоговой аттестации могут использоваться такие сервисы как: Яндекс.Формы, Zoom, Skype, отдельные специализированные модули LMS.

10. ПЕРЕЧЕНЬ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ В ОБРАЗОВАТЕЛЬНОМ ПРОЦЕССЕ

Информационную поддержку изучения дисциплины осуществляет Информационно-библиотечный центр (ИБЦ) РХТУ им. Д.И. Менделеева, который обеспечивает обучающихся основной учебной, учебно-методической и научной литературой, необходимой для организации образовательного процесса по дисциплине. Общий объем многоотраслевого фонда ИБЦ на 01.01.2024 составляет 1 559 436 экз.

Фонд ИБЦ располагает учебной, учебно-методической и научно-технической литературой в форме печатных и электронных изданий, а также включает официальные, справочно-библиографические, специализированные отечественные и зарубежные периодические и информационные издания. ИБЦ обеспечивает доступ к профессиональным базам данных, информационным, справочным и поисковым системам.

Каждый обучающийся обеспечен свободным доступом из любой точки, в которой имеется доступ к сети Интернет и к электронно-библиотечной системе (ЭБС) Университета, которая содержит различные издания по основным изучаемым дисциплинам и сформирована по согласованию с правообладателями учебной и учебно-методической литературы.

Для более полного и оперативного справочно-библиографического и информационного обслуживания в ИБЦ реализована технология Электронной доставки документов.

Полный перечень электронных информационных ресурсов, используемых в процессе обучения, представлен в основной образовательной программе.

11. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

В соответствии с учебным планом занятия по дисциплине *«Современные направления и методы получения биологически активных веществ»* проводятся в форме лекций, практических занятий и самостоятельной работы обучающегося.

11.1. Оборудование, необходимое в образовательном процессе:

Лекционная учебная аудитория, оборудованная электронными средствами демонстрации (компьютер со средствами звуковоспроизведения, проектор, экран) и учебной мебелью.

Библиотека, имеющая рабочие места, оснащенные компьютерами с доступом к базам данных и выходом в Интернет.

11.2. Учебно-наглядные пособия:

Графики и таблицы, иллюстрирующие лекционный материал.

Раздаточный материал к разделам лекционного курса.

11.3. Компьютеры, информационно-телекоммуникационные сети, аппаратно-программные и аудиовизуальные средства:

Персональные компьютеры, укомплектованные проигрывателями CD и DVD, принтерами и программными средствами.

Проекторы и экраны.

Копировальные аппараты.

Локальная сеть с выходом в Интернет.

11.4. Печатные и электронные образовательные и информационные ресурсы:

Информационно-методические материалы: учебные пособия по дисциплине.
Электронные образовательные ресурсы: учебно-методические разработки в электронном виде; справочные материалы в печатном и электронном виде; кафедральная библиотека электронных изданий.

11.5. Перечень лицензионного программного обеспечения:

Полный перечень лицензионного программного обеспечения представлен в основной образовательной программе.

№ п.п.	Наименование программного продукта	Реквизиты договора поставки	Срок окончания действия лицензии
1.	Антиплагиат.VY3 5.0	Контракт №34-523К/2024 от 08.05.2024	19.05.2025
2.	WINDOWS 8.1 Professional Get Genuine	Контракт № 62-64ЭА/2013 от 02.12.2013	бессрочно
3.	Microsoft Office Standard 2013	Контракт № 62-64ЭА/2013 от 02.12.2013	бессрочная
4.	WINHOME 10 Russian OLV NL Each AcademicEdition	Контракт № 28-35ЭА/2020 от 26.05.2020	бессрочно
5.	Microsoft Office Standard 2019 В составе: • Word • Excel • Power Point • Outlook	Контракт №175- 262ЭА/2019 от 30.12.2019	12 месяцев (ежегодное продление подписки с правом перехода на обновлённую версию продукта)
6.	Kaspersky Endpoint Security для бизнеса – Стандартный Russian Edition.	Договор № 99-155ЭА-223/2024	12 месяцев (ежегодное продление подписки с правом перехода на обновлённую версию продукта)

12. ТРЕБОВАНИЯ К ОЦЕНКЕ КАЧЕСТВА ОСВОЕНИЯ ПРОГРАММЫ

Наименование модулей	Основные показатели оценки	Формы и методы контроля и оценки

Раздел 1. Планирование синтеза сложных органических молекул с применением ретросинтеза	<i>Знает:</i> -современные тенденции развития и проблемы химии биологически активных веществ; -теоретические основы современных методов получения биологически активных веществ; <i>Умеет:</i>	Оценка за домашнее индивидуальное задание №1-3 (по 15 баллов каждое) (2 семестр) Оценка за зачет (2 семестр)
	-разработать схемы синтеза биологически активных веществ с учетом принципов стратегии органического синтеза; -анализировать альтернативные методы синтеза конкретных веществ с учетом доступности реагентов, стадийности, селективности процесса; <i>Владеет:</i> -методами критического анализа способов синтеза биологически активных веществ;	
Раздел 2. Стереоселективный синтез БАВ	<i>Знает:</i> -способы разделения и анализа пространственных изомеров; -примеры каталитических процессов в химии биологически активных веществ; -примеры стереонаправленного синтеза биологически активных веществ. <i>Умеет:</i> -разработать схемы синтеза биологически активных веществ с учетом принципов стратегии органического синтеза; -анализировать альтернативные методы синтеза конкретных веществ с учетом доступности реагентов, стадийности, селективности процесса; <i>Владеет:</i> -методами критического анализа способов синтеза биологически активных веществ; -методами стереонаправленного синтеза целевых биологически активных веществ;	Оценка за домашнее индивидуальное задание №4-7 (10, 15, 15 и 15 баллов соответственно) (2 семестр); Оценка за Контрольную работу №1 (20 баллов), (2 семестр) Оценка за зачет (2 семестр)

Раздел 3. Основы супрамолекулярной химии. Применение супрамолекулярных систем в технологии биологически-активных веществ	<i>Знает:</i> -принципы создания супрамолекулярных ансамблей, <i>Умеет:</i> -анализировать альтернативные методы синтеза конкретных веществ с учетом доступности реагентов, стадийности, селективности процесса; <i>Владеет:</i> -методами сборки супрамолекулярных структур с заданными свойствами.	Оценка за реферат (20 баллов) (2 семестр) Оценка за экзамен (3 семестр)
Раздел 4. Методы синтеза и применение органических соединений, меченых изотопами	<i>Знает:</i> -методы синтеза и применения меченных изотопами биологически активных веществ, <i>Умеет:</i> -разработать схемы синтеза биологически активных веществ с учетом принципов стратегии органического синтеза; <i>Владеет:</i> -методами критического анализа способов синтеза биологически активных веществ;	Оценка за Контрольную работу №2 (20 баллов), (3 семестр) Оценка за экзамен (3 семестр)

13. ОСОБЕННОСТИ ОРГАНИЗАЦИИ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО ПРОЦЕССА ДЛЯ ИНВАЛИДОВ И ЛИЦ С ОГРАНИЧЕННЫМИ ВОЗМОЖНОСТЯМИ ЗДОРОВЬЯ

Обучение инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья осуществляется в соответствии с:

- Порядком организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры (Приказ Министерства науки и высшего образования Российской Федерации от 06.04.2021 № 245);

- Положением о порядке организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева», принятым решением Ученого совета РХТУ им. Д.И. Менделеева от 28.12.2022, протокол № 5;

- Методическими рекомендациями по организации образовательного процесса для обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья в образовательных организациях высшего образования, в том числе оснащенности образовательного процесса (утверждены заместителем Министра образования и науки РФ А.А. Климовым от 08.04.2014 № АК-44/05вн).

**Дополнения и изменения к рабочей программе дисциплины
«Современные направления и методы получения биологически активных
веществ»**

основной образовательной программы

Направление подготовки 18.04.01 – Химическая технология
Магистерская программа «Химия и технология биологически активных веществ»

Форма обучения: очная

—

Номер изменения/ дополнения	Содержание дополнения/изменения	Основание внесения изменения/дополнения
1.		протокол заседания Ученого совета №_____от «___»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «___»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «___»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «___»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «___»_____20__г.

**Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Российский химико-технологический университет
имени Д.И. Менделеева»**

«УТВЕРЖДЕНО»

на заседании Ученого совета

РХТУ им. Д.И. Менделеева

протокол № 1 от «29» августа 2024 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

«Стратегия органического синтеза»

Направление подготовки 18.04.01 Химическая технология
(Код и наименование направления подготовки)

**Магистерская программа – «Химия и технология биологически активных
веществ»**
(Наименование магистерской программы)

Квалификация «магистр»

Москва 2024

Программа составлена:

д.х.н., доц., проф. РАН, чл.-корр. РАН, профессором кафедры химии и технологии органического синтеза РХТУ имени Д.И. Менделеева А.О. Терентьевым

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры химии и технологии органического синтеза

«26» апреля 2024 г., протокол № 7

1. ЦЕЛЬ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ

Программа составлена в соответствии с требованиями Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования – магистратура по направлению подготовки **18.04.01 Химическая технология** (ФГОС ВО), рекомендациями Методической комиссии и накопленным опытом преподавания дисциплины кафедрой **Химии и технологии органического синтеза** РХТУ им. Д.И. Менделеева. Программа рассчитана на изучение дисциплины в течение одного семестров.

Дисциплина **«Стратегия органического синтеза»** относится к дисциплинам по выбору части дисциплин учебного плана, формируемой участниками образовательных отношений и рассчитана на изучение в одном семестре. Программа дисциплины предполагает, что обучающиеся имеют теоретическую и практическую подготовку в области изучения дисциплин: «Общая и неорганическая химия», «Органическая химия», а также «Методы органического синтеза», «Химия и технология биологически активных веществ».

Цель дисциплины –повышение научно-технической и методологической компетенций студента, необходимых для решения профессиональных задач, связанных с проведением научно-исследовательской работы; ознакомление с современным уровнем развития, тенденциями развития современного органического синтеза для получения биологически активных веществ.

Задачи дисциплины –

- изучить современные методы органического синтеза получения биологически активных веществ и методы катализа в органическом синтезе;
- освоить рациональные схемы синтеза органических веществ с учетом тенденций развития современного органического синтеза;
- сформировать навыки выбора эффективных способов синтеза целевых биологически активных веществ.

Дисциплина **«Стратегия органического синтеза»** преподается во 2 семестре. Контроль успеваемости студентов ведется по принятой в университете рейтинговой системе.

Рабочая программа дисциплины может быть реализована с применением электронных образовательных технологий и электронного обучения полностью или частично.

2. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Изучение дисциплины направлено на приобретение следующих **компетенций и индикаторов их достижения:**

Профессиональные компетенции и индикаторы их достижения:

Задача профессиональной деятельности	Объект или область знания	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК	Основание (профессиональный стандарт, анализ опыта) Обобщенные трудовые функции
Научно-исследовательский тип задач профессиональной деятельности				
Выполнение фундаментальных и прикладных работ поискового, теоретического и экспериментального характера с целью определения технических характеристик новой техники, а также комплекса работ по разработке технологической документации.	Химическое, химико-технологическое производство Сквозные виды профессиональной деятельности в промышленности (в сфере организации и проведения научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ в области химического и химико-технологического производства).	ПК-2. Способен к поиску, обработке, анализу и систематизации научно-технической информации по теме исследования, выбору методик и средств решения задачи	ПК-2.1. Знает алгоритм поиска, оценки и анализа научно-технической информации.	Профессиональный стандарт 40.011 «Специалист по научно-исследовательским и опытно-конструкторским разработкам», утвержденный приказом Министерства труда и социальной защиты Российской Федерации от 04.03.2014 № 121 н, Обобщенная трудовая функция С. Проведение научно-исследовательских и опытно-конструкторских разработок. С /01.6. Осуществление научного руководства проведением исследований по отдельным задачам (уровень квалификации – 6).
			ПК-2.2. Умеет обобщать и систематизировать научно-техническую информацию.	
			ПК-2.3. Владеет навыками соотнесения результатов собственной научной работы с отечественным и зарубежным опытом по тематике исследования.	
		ПК-4. Способен проводить поисковые исследования инновационных технологических процессов в области биологически активных веществ.	ПК-4.2. Умеет производить поисковые работы для разработки новых методов получения и анализа биологически активных веществ.	
ПК-5. Способен осуществлять самостоятельные научные исследования в	ПК-5.1. Знает методы получения, особенности производства, свойства и механизмы действия биологически активных веществ различных классов.			

Задача профессиональной деятельности	Объект или область знания	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК	Основание (профессиональный стандарт, анализ опыта) Обобщенные трудовые функции
		области химии и технологии биологически активных веществ.	ПК-5.2. Знает теоретические основы функционирования живых организмов в норме и при патологии, необходимые для осуществления научных исследований по химии биологически активных веществ.	
			ПК-5.3. Умеет использовать теоретические знания по химии и технологии биологически активных веществ для решения конкретных задач научно-исследовательской деятельности.	

В результате изучения дисциплины студент магистратуры должен:

Знать:

- современные тенденции органического синтеза;
- теоретические основы современных методов органического синтеза при получении биологически активных веществ;
- основы каталитических процессов в органическом синтезе;
- принципы органического синтеза полупродуктов для получения биологически активных веществ;
- примеры получения биологически активных веществ.

Уметь:

- находить известные в литературных источниках или предложить рациональные схемы синтеза новых органических веществ;
- обосновывать эффективность способа синтеза органических веществ, выбирать и применять к предмету своего исследования соответствующие способы синтеза целевых биологически активных веществ.

Владеть:

- методами синтеза органических биологически активных веществ;
- теоретическими основами современных методов получения биологически активных веществ;
- основами каталитических процессов в органическом синтезе.

3. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Вид учебной работы	Объем дисциплины		
	ЗЕ	Акад. ч.	Астр.ч.
Общая трудоемкость дисциплины	2	72	54
Контактная работа – аудиторные занятия:	0,94	34	25,5
в том числе в форме практической подготовки	0,47	17	12,75
Лекции	0,47	17	12,75
Практические занятия	0,47	17	12,75
в том числе в форме практической подготовки	0,47	17	12,75
Самостоятельная работа	1,06	38	28,5
Контактная самостоятельная работа	1,06	0,3	0,23
Самостоятельное изучение разделов дисциплины		37,7	28,27
Вид итогового контроля:	Зачет с оценкой		

4. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

4.1. Разделы дисциплины и виды занятий для студентов очного отделения

№ п/п	Раздел дисциплины	Академ. часов								
		Всего	в т.ч. в форме пр. подг.	Лек- ции	в т.ч. в форме пр. подг.	Прак. зан.	в т.ч. в форме пр. подг.	Лаб. работы	в т.ч. в форме пр. подг.	Сам. рабо-та
1.	Введение.	10	1	4	-	1	1	-	-	5
2.	Раздел 1. Современные методы получения и свойства спиртов, простых эфиров и пероксидов. Синтез биологически активных веществ на их основе.	18	5	4	-	5	5	-	-	9
3.	Раздел 2. Современные методы получения и свойства альдегидов, кетонов. Синтез биологически активных веществ на их основе.	17,5	4,5	4	-	4,5	4,5	-	-	9
4.	Раздел 3. Современные методы получения и свойства кислот и их производных. Синтез биологически активных веществ на их основе.	16,5	4,5	4	-	4,5	4,5	-	-	8
5.	Раздел 4. Современные тенденции и принципы разработки методов синтеза биологически активных веществ.	10	2	1	-	2	2	-	-	7
6.	Зачет с оценкой	-	-	-	-	-	-	-	-	
	ИТОГО	72	17	17	-	17	17	-	-	38

4.2. Содержание разделов дисциплины

Введение.

Основные современные тенденции органического синтеза. Терминология и основные понятия.

Раздел 1. Современные методы получения и свойства спиртов, простых эфиров и пероксидов. Синтез биологически активных веществ на их основе.

Синтез спиртов. Превращения спиртов. Синтез простых эфиров и пероксидов. Превращение простых эфиров и пероксидов.

Раздел 2. Современные методы получения и свойства альдегидов, кетонов. Синтез биологически активных веществ на их основе.

Основы реакционной способности альдегидов и кетонов. Методы получения кетонов и альдегидов с использованием реакций окисления и восстановления. Катализируемые основаниями превращения альдегидов и кетонов. Катализируемые кислотами превращения альдегидов и кетонов. Окислительно-восстановительные превращения альдегидов и кетонов. Альдегиды и кетоны – стартовые реагенты для образования $C=C$ и $C\equiv C$ связей.

Раздел 3. Современные методы получения и свойства кислот и их производных. Синтез биологически активных веществ на их основе.

Синтез и превращения кислот. Синтез и превращения ангидридов и сложных эфиров.

Раздел 4. Современные тенденции и принципы разработки методов синтеза биологически активных веществ.

Процессы функционализации $C-H$ связей без участия металлов. Органокатализ и асимметрический органокатализ. Фоторедокс катализ при действии видимого света.

5. СООТВЕТСТВИЕ СОДЕРЖАНИЯ ТРЕБОВАНИЯМ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

№	В результате освоения дисциплины студент должен:		Раздел 1	Раздел 2	Раздел 3	Раздел 4
	Знать:					
1	современные тенденции органического синтеза;		+	+	+	+
2	теоретические основы современных методов органического синтеза при получении биологически активных веществ;		+	+	+	+
3	основы каталитических процессов в органическом синтезе;		+	+	+	+
4	принципы органического синтеза полупродуктов для получения биологически активных веществ;		+	+	+	+
5	примеры получения биологически активных веществ;		+	+	+	+
	Уметь:					
6	находить известные в литературных источниках или предложить рациональные схемы синтеза новых органических веществ;		+	+	+	+
7	обосновывать эффективность способа синтеза органических веществ, выбирать и применять к предмету своего исследования соответствующие способы синтеза целевых биологически активных веществ;		+	+	+	+
	Владеть:					
8	методами синтеза органических биологически активных веществ;		+	+	+	+
9	теоретическими основами современных методов получения биологически активных веществ;		+	+	+	+
10	основами каталитических процессов в органическом синтезе.		+	+	+	+
	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК				

11	ПК-2. Способен к поиску, обработке, анализу и систематизации научно-технической информации по теме исследования, выбору методик и средств решения задачи	ПК-2.1. Знает алгоритм поиска, оценки и анализа научно-технической информации.	+	+	+	+
12		ПК-2.2. Умеет обобщать и систематизировать научно-техническую информацию.	+	+	+	+
13		ПК-2.3. Владеет навыками соотнесения результатов собственной научной работы с отечественным и зарубежным опытом по тематике исследования.	+	+	+	+
14	ПК-4. Способен проводить поисковые исследования инновационных технологических процессов в области биологически активных веществ.	ПК-4.2. Умеет производить поисковые работы для разработки новых методов получения и анализа биологически активных веществ.	+	+	+	+
15	ПК-5. Способен осуществлять самостоятельные научные исследования в области химии и технологии биологически активных веществ.	ПК-5.1. Знает методы получения, особенности производства, свойства и механизмы действия биологически активных веществ различных классов.	+	+	+	+
16		ПК-5.2. Знает теоретические основы функционирования живых организмов в норме и при патологии, необходимые для осуществления научных исследований по химии биологически активных веществ.	+	+	+	+

17		ПК-5.3. Умеет использовать теоретические знания по химии и технологии биологически активных веществ для решения конкретных задач научно-исследовательской деятельности.	+	+	+	+

6. ПРАКТИЧЕСКИЕ И ЛАБОРАТОРНЫЕ ЗАНЯТИЯ

6.1. Практические занятия

Примерные темы практических занятий по дисциплине.

№ п/п	№ раздела дисциплины	Темы практических занятий	Часы
1	1	Практическое занятие 1	1,5
2	2	Практическое занятие 2	5,5
3	2	Практическое занятие 3	5,5
4	3	Практическое занятие 4	5,5
5	3	Практическое занятие 5	5,5
6	4	Практическое занятие 6	5,5
7	4	Практическое занятие 7	5,5
8	5	Практическое занятие 8	3,5
ИТОГО:			

6.2. Лабораторные занятия

Выполнение лабораторного практикума учебным планом дисциплины «*Стратегия органического синтеза*» не предусмотрено.

7. САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА

Самостоятельная работа проводится с целью углубления знаний по дисциплине и предусматривает:

- регулярную проработку пройденного на лекциях и практических занятиях учебного материала;
- подготовку к контрольным работам по материалу лекционного курса;
- работу с рекомендованной учебной и научной литературой, работу с электронно-библиотечными системами, включая переводы публикаций из научных журналов, цитируемых в базах Scopus, Web of Science, Chemical Abstracts, РИНЦ;
- участие в семинарах РХТУ им. И. Менделеева по тематике курса;
- посещение отраслевых выставок, семинаров и конференций;
- подготовку к сдаче *зачета с оценкой* (2 семестр) по курсу.

Планирование времени на самостоятельную работу, необходимого на изучение дисциплины, студентам лучше всего осуществлять на весь период изучения, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала. Материал, законспектированный на лекциях, необходимо регулярно дополнять сведениями из литературных источников, представленных в учебной программе. При работе с указанными источниками рекомендуется составлять краткий конспект материала, с обязательным фиксированием библиографических данных источника.

8. ПРИМЕРЫ ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ КОНТРОЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Совокупная оценка по дисциплине складывается из оценок за выполнение контрольных работ (максимальная оценка 60 баллов) и итогового контроля в форме *зачета с оценкой* (максимальная оценка 40 баллов).

8.1. Примерная тематика реферативно-аналитической работы.

Выполнение реферативно-аналитической работы учебным планом дисциплины «*Стратегия органического синтеза*» не предусмотрено.

8.2. Примеры контрольных вопросов для текущего контроля освоения дисциплины

Для текущего контроля предусмотрено 3 контрольные работы (по одной контрольной работе по каждому разделу). Максимальная оценка за контрольные работы №1, №2 и №3 (2 семестр) составляет 60 баллов, по 20 баллов за каждую работу.

Раздел 1. Современные методы получения и свойства спиртов, простых эфиров и пероксидов. Синтез биологически активных веществ на их основе. Примеры вопросов к контрольной работе №1. Максимальная оценка – 20 баллов. Контрольная работа содержит 2 вопроса, по 10 баллов за вопрос.

1. Реакции замещения. S_N1 и S_N2 реакции.
2. Реакции отщепления. Сравнение реакций нуклеофильного замещения S_N2 и элиминирования $E2$.

Вариант 1.

1. Синтез простых эфиров по Вильямсону. Синтез краун-эфиров.
2. Реакция Удриса-Сергеева-Кружалова. Схема получения фенола и ацетона.

Раздел 2. Современные методы получения и свойства альдегидов, кетонов. Синтез биологически активных веществ на их основе. Примеры вопросов к контрольной работе №2. Максимальная оценка – 20 баллов. Контрольная работа содержит 2 вопроса, по 10 баллов за вопрос.

1. Основы реакционной способности альдегидов и кетонов: взаимодействие с кислотами; присоединение оснований; реакция с аминами; кислотнo-катализируемое присоединение нуклеофилов к карбонильной группе; отрыв протона под действием оснований.
2. Кето-енольная таутомерия с участием кислот. Механизм, катализируемого основаниями, бромирования кетонов. Получение и применение промышленно важных альдегидов: формальдегида, ацетальдегида, акролеина.

Вариант 1.

1. Реакция Гаттермана-Коха: формилирование ароматов действием монооксида углерода в присутствии катализатора - кислоты Льюиса. Реакция Вильсмайера – Хаака.
2. Кротоновая конденсация. Альдольная - кротоновая конденсация алифатического и ароматического альдегидов. Альдольная - кротоновая конденсация ароматического кетона и альдегида. Получение прекурсоров азольных фунгицидов по реакции Кляйзена_Шмидта).

Раздел 3. Современные методы получения и свойства кислот и их производных. Синтез биологически активных веществ на их основе. Примеры вопросов к контрольной работе №3. Максимальная оценка – 20 баллов. Контрольная работа содержит 2 вопроса, по 10 баллов за вопрос.

1. Реакция Виттига.
2. Реакция Хорнера-Уодсворта-Эммонса.

Вариант 1.

1. Реакция Хорнера-Уодсворта-Эммонса.
2. Синтез аминокислот по Штрекеру. Промышленное получение метионина и глутаминовой кислоты.

Раздел 4. Современные тенденции и принципы разработки методов синтеза биологически активных веществ.

Не предусмотрены.

8.3. Вопросы для итогового контроля освоения дисциплины (2 семестр – зачет с оценкой).

Максимальное количество баллов за зачет с оценкой – 40 баллов. Контрольный билет содержит 2 вопроса. 1 вопрос – 20 баллов, вопрос 2 – 20 баллов.

8.3.1. Примеры контрольных вопросов для итогового контроля освоения дисциплины (II семестр – зачет с оценкой).

Максимальное количество баллов за зачет с оценкой – 40 баллов

1. Основы реакционной способности альдегидов и кетонов: взаимодействие с кислотами; присоединение оснований; реакция с аминами; кислотнo-катализируемое присоединение нуклеофилов к карбонильной группе; отрыв протона под действием оснований.

2. Кето-енольная таутомерия с участием кислот. Механизм катализируемого основаниями бромирования кетонов. Получение и применение промышленно важных альдегидов: формальдегида, ацетальдегида, акролеина.

Фонд оценочных средств приведен в виде отдельного документа, являющегося неотъемлемой частью основной образовательной программы.

8.4. Структура и примеры билетов для зачета с оценкой (II семестр).

Зачет с оценкой по дисциплине «Стратегия органического синтеза» проводится во 2 семестре и включает контрольные вопросы по всем разделам учебной программы дисциплины. Билет для зачета с оценкой состоит из 2 вопросов, относящихся к указанным разделам. Ответы на вопросы зачета с оценкой оцениваются из максимальной оценки 40 баллов следующим образом: максимальное количество баллов за первый вопрос – 20 баллов, за второй – 20 баллов.

Пример билета для зачета с оценкой:

<i>«Утверждаю»</i> <i>зав. кафедрой ХТОС</i> _____ С.В. Попков (Подпись) «__» _____ 20__ г.	Министерство науки и высшего образования РФ
	Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева
	Кафедра химии и технологии органического синтеза
	18.04.01 – «Химическая технология»
	Магистерская программа – «Химия и технология биологически активных веществ»
«Стратегия органического синтеза»	
Билет зачета с оценкой № 1	
1. Кето-енольная таутомерия с участием кислот. Механизм катализируемого основаниями бромирования кетонов. Получение и применение промышленно важных альдегидов: формальдегида, ацетальдегида, акролеина.	
2. Реакция Кольбе-Шмитта. Промышленный синтез аспирина.	

9. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

9.1. Рекомендуемая литература

А. Основная литература

1. Травень В. Ф. Органическая химия: учебник для вузов; в 3 т. / В. Ф. Травень. - М.: БИНОМ Лаборатория знаний, 2013. — ISBN 978-5-9963-2938-0
2. Основы современного органического синтеза: учебное пособие. В. А. Смит, А. Д. Дильман. - 3-е изд. (эл.). - М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2014. - 750 с..
3. Лисицын В.Н.. Химия и технология ароматических соединений: учебн. по-сobie /— М.: ДеЛи плюс, 2014. — 391 с
4. Химическая технология лекарственных веществ. Основные процессы химического синтеза биологически активных веществ [Электронный ресурс] : учебное пособие / А.А. Иозеп [и др.] ; под ред. Иозеп А.А.. — Электрон.дан. — Санкт-Петербург : Лань, 2017. — 356 с.
5. Мантров С.Н., Дашкин Р.Р., Комарицких М.Ю. Химия гетероциклических соединений и синтез фармсубстанций на их основе: Учебное пособие - М.: Издательство РХТУ, 2015. - 196 с.

Б. Дополнительная литература

1. Сайкс П. Механизмы реакций в органической химии. — М.: "Химия", 1991.
2. Мельников Н.Н., Пестициды. Химия, технология и применение. М.: Химия, 1987, 712 с
3. Ли Дж. Именные реакции. Механизмы органических реакций. — М.: Бином. Лаборатория знаний, 2006, 456 с.
4. Титце Л., Айхер Т. Препаративная органическая химия. Реакции и синтезы в практикуме органической химии и научно-исследовательской лаборатории. М.: Мир, 2004. - 704 с.
5. Титце Л. Domino-реакции в органическом синтезе [Электронный ресурс] : учебное пособие / Л. Титце, Г. Браше, Герики К. ; под ред. Л. И. Беленького ; пер. с англ. Л. И. Беленького, К. К. Пивницкого, В. Н. Граменицкой, С. И. Луйксаара. — Электрон.дан. — Москва : Издательство "Лаборатория знаний", 2017. — 674 с.

9.2. Рекомендуемые источники научно-технической информации

- учебные пособия по дисциплине;
- электронные презентации к разделам лекционного курса;
- справочные материалы в печатном и электронном виде;
- кафедральные библиотеки электронных изданий.

Научно-технические журналы:

- Журнал «Химико-фармацевтический журнал» ISSN 0023-1134.

Ресурсы информационно-телекоммуникационной сети Интернет:

- <http://lib.muctr.ru/> - фонды учебной, учебно-методической, научной, периодической научно-технической литературы Информационно-библиотечного центра (ИБЦ) РХТУ им. Д. И. Менделеева;
- <http://www.muctr.ru/univsubs/infacol/hft/faculties/f4-> сайт кафедры химии и технологии органического синтеза

9.3. Средства обеспечения освоения дисциплины

Для реализации учебной программы подготовлены следующие средства обеспечения освоения дисциплины:

- компьютерные презентации интерактивных лекций – 16, (общее число слайдов – 328);

Для реализации учебной программы с использованием электронного обучения

(ЭО) и дистанционных образовательных технологий (ДОТ) применяются следующие образовательные технологии и средства обеспечения дисциплины:

- ЕИОС РХТУ им. Д.И. Менделеева;
- платформы для проведения онлайн конференций (Zoom, Skype и др.);
- сервисы по доставки e-mail сообщений.

Для проведения промежуточных и итоговой аттестации могут использоваться такие сервисы как: Яндекс.Формы, Zoom, Skype, отдельные специализированные модули LMS.

10. ПЕРЕЧЕНЬ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ В ОБРАЗОВАТЕЛЬНОМ ПРОЦЕССЕ

Информационную поддержку изучения дисциплины осуществляет Информационно-библиотечный центр (ИБЦ) РХТУ им. Д.И. Менделеева, который обеспечивает обучающихся основной учебной, учебно-методической и научной литературой, необходимой для организации образовательного процесса по дисциплине. Общий объем многоотраслевого фонда ИБЦ на 01.01.2024 составляет 1 559 436 экз.

Фонд ИБЦ располагает учебной, учебно-методической и научно-технической литературой в форме печатных и электронных изданий, а также включает официальные, справочно-библиографические, специализированные отечественные и зарубежные периодические и информационные издания. ИБЦ обеспечивает доступ к профессиональным базам данных, информационным, справочным и поисковым системам.

Каждый обучающийся обеспечен свободным доступом из любой точки, в которой имеется доступ к сети Интернет и к электронно-библиотечной системе (ЭБС) Университета, которая содержит различные издания по основным изучаемым дисциплинам и сформирована по согласованию с правообладателями учебной и учебно-методической литературы.

Для более полного и оперативного справочно-библиографического и информационного обслуживания в ИБЦ реализована технология Электронной доставки документов.

Полный перечень электронных информационных ресурсов, используемых в процессе обучения, представлен в основной образовательной программе.

11. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

В соответствии с учебным планом занятия по дисциплине «*Стратегия органического синтеза*» проводятся в форме лекций и самостоятельной работы обучающегося.

11.1. Оборудование, необходимое в образовательном процессе:

Лекционная учебная аудитория, оборудованная электронными средствами демонстрации (компьютер со средствами звуковоспроизведения, проектор, экран) и учебной мебелью.

Библиотека, имеющая рабочие места, оснащенные компьютерами с доступом к базам данных и выходом в Интернет

11.2. Учебно-наглядные пособия:

Учебные пособия по дисциплине.

Электронные презентации к разделам лекционного курса.

Справочные материалы в печатном и электронном виде.

Кафедральные библиотеки электронных изданий.

11.3. Компьютеры, информационно-телекоммуникационные сети, аппаратно-программные и аудиовизуальные средства:

Персональные компьютеры, укомплектованные проигрывателями CD и DVD, принтерами и программными средствами.

Проекторы и экраны.

Копировальные аппараты.

Локальная сеть с выходом в Интернет.

11.4. Печатные и электронные образовательные и информационные ресурсы:

Информационно-методические материалы: учебные пособия по дисциплине.

Электронные образовательные ресурсы: учебно-методические разработки в электронном виде; справочные материалы в печатном и электронном виде; кафедральная библиотека электронных изданий.

11.5. Перечень лицензионного программного обеспечения:

Полный перечень лицензионного программного обеспечения представлен в основной образовательной программе.

№ п.п.	Наименование программного продукта	Реквизиты договора поставки	Срок окончания действия лицензии
1.	WINDOWS 8.1 Professional Get Genuine	Контракт № 62-64ЭА/2013 от 02.12.2013	бессрочно
2.	Micosoft Office Standard 2013	Контракт № 62-64ЭА/2013 от 02.12.2013	бессрочная
3.	WINHOME 10 Russian OLV NL Each AcademicEdition	Контракт № 28-35ЭА/2020 от 26.05.2020	бессрочно
4.	Microsoft Office Standard 2019 В составе: • Word • Excel • Power Point • Outlook	Контракт №175- 262ЭА/2019 от 30.12.2019	12 месяцев (ежегодное продление подписки с правом перехода на обновлённую версию продукта)
5.	Kaspersky Endpoint Security для бизнеса – Стандартный Russian Edition.	Договор № 99-155ЭА-223/2024	12 месяцев (ежегодное продление подписки с правом перехода на обновлённую версию продукта)

12. ТРЕБОВАНИЯ К ОЦЕНКЕ КАЧЕСТВА ОСВОЕНИЯ ПРОГРАММЫ

Наименование разделов	Основные показатели оценки	Формы и методы контроля и оценки

Раздел 1. Введение	<i>Знает:</i> – современные тенденции органического синтеза; – теоретические основы современных методов органического синтеза при получении биологически активных веществ; – основы каталитических процессов в органическом синтезе; – принципы органического синтеза полупродуктов для получения биологически активных веществ; – примеры получения биологически активных веществ. <i>Умеет:</i> – найти известные в литературных источниках или предложить рациональные схемы синтеза новых органических веществ; – обосновывать эффективность способа синтеза органических веществ, выбирать и применять к предмету своего исследования соответствующие способы синтеза целевых биологически активных веществ. <i>Владеет:</i> – методами синтеза органических биологически активных веществ;	Оценка за зачет с оценкой (2 семестр).
	– теоретическими основами современных методов получения биологически активных веществ; – основами каталитических процессов в органическом синтезе.	

Раздел 2. Современные методы получения и свойства спиртов, простых эфиров и пероксидов. Синтез биологически активных веществ на их основе.	<i>Знает:</i> – современные тенденции органического синтеза; – теоретические основы современных методов органического синтеза при получении биологически активных веществ; – основы каталитических процессов в органическом синтезе; – принципы органического синтеза полупродуктов для получения биологически активных веществ; – примеры получения биологически активных веществ. <i>Умеет:</i> – найти известные в литературных источниках или предложить рациональные схемы синтеза новых органических веществ; – обосновывать эффективность способа синтеза органических веществ, выбирать и применять к предмету своего исследования соответствующие способы синтеза целевых биологически активных веществ. <i>Владеет:</i> – методами синтеза органических биологически активных веществ; – теоретическими основами современных методов получения биологически активных веществ; – основами каталитических процессов в органическом синтезе.	Оценка за контрольную работу №1 (2 семестр) Оценка за зачет с оценкой (2 семестр).
Раздел 3. Современные методы получения и свойства альдегидов, кетонов. Синтез биологически активных веществ на их основе.	<i>Знает:</i> – современные тенденции органического синтеза; – теоретические основы современных методов органического синтеза при получении биологически активных веществ; – основы каталитических процессов в органическом синтезе; – принципы органического синтеза полупродуктов для получения биологически активных веществ; – примеры получения биологически активных веществ.	Оценка за контрольную работу №3 (2 семестр). Оценка за зачет с оценкой (2 семестр)..

	<i>Умеет:</i> – найти известные в литературных источниках или предложить рациональные схемы синтеза новых органических веществ; – обосновывать эффективность способа синтеза органических веществ, выбирать и применять к предмету своего исследования соответствующие способы синтеза целевых биологически активных веществ. <i>Владеет:</i> – методами синтеза органических биологически активных веществ; – теоретическими основами современных методов получения биологически активных веществ; – основами каталитических процессов в органическом синтезе.	
Раздел 4. Современные методы получения и свойства кислот и их производных. Синтез биологически активных веществ на их основе.	<i>Знает:</i> – современные тенденции органического синтеза; – теоретические основы современных методов органического синтеза при получении биологически активных веществ; – основы каталитических процессов в органическом синтезе; – принципы органического синтеза полупродуктов для получения биологически активных веществ; – примеры получения биологически активных веществ. <i>Умеет:</i> – найти известные в литературных источниках или предложить рациональные схемы синтеза новых органических веществ; – обосновывать эффективность способа синтеза органических веществ, выбирать и применять к предмету своего исследования соответствующие способы синтеза целевых биологически активных веществ. <i>Владеет:</i> – методами синтеза органических биологически активных веществ; – теоретическими основами современных методов получения биологически активных веществ;	Оценка за контрольную работу №3 (2семестр). Оценка за зачет с оценкой (2семестр).
	– основами каталитических	

	процессов в органическом синтезе.	
Раздел 5. Современные тенденции и принципы разработки методов синтеза биологически активных веществ	<i>Знает:</i> – современные тенденции органического синтеза; – теоретические основы современных методов органического синтеза при получении биологически активных веществ; – основы каталитических процессов в органическом синтезе; – принципы органического синтеза полупродуктов для получения биологически активных веществ; – примеры получения биологически активных веществ. <i>Умеет:</i> – найти известные в литературных источниках или предложить рациональные схемы синтеза новых органических веществ; – обосновывать эффективность способа синтеза органических веществ, выбирать и применять к предмету своего исследования соответствующие способы синтеза целевых биологически активных веществ. <i>Владеет:</i> – методами синтеза органических биологически активных веществ; – теоретическими основами современных методов получения биологически активных веществ; основами каталитических процессов в органическом синтезе.	Оценка за зачет с оценкой (2семестр).

13. ОСОБЕННОСТИ ОРГАНИЗАЦИИ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО ПРОЦЕССА ДЛЯ ИНВАЛИДОВ И ЛИЦ С ОГРАНИЧЕННЫМИ ВОЗМОЖНОСТЯМИ ЗДОРОВЬЯ

Обучение инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья осуществляется в соответствии с:

- Порядком организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры (Приказ Министерства науки и высшего образования Российской Федерации от 06.04.2021 № 245);

- Положением о порядке организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева», принятым решением Ученого совета РХТУ им. Д.И. Менделеева от 28.12.2022, протокол № 5;

- Методическими рекомендациями по организации образовательного процесса для обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья в образовательных организациях высшего образования, в том числе оснащённости образовательного процесса (утверждены заместителем Министра образования и науки РФ А.А. Климовым от 08.04.2014 № АК-44/05вн).

**Дополнения и изменения к рабочей программе дисциплины
«Стратегия органического синтеза»**

основной образовательной программы

Направление подготовки 18.04.01 – Химическая технология
Магистерская программа «Химия и технология биологически активных веществ»

Форма обучения: очная

Номер изменения/ дополнения	Содержание дополнения/изменения	Основание внесения изменения/дополнения
1.		протокол заседания Ученого совета № _____ от «__» ____ 20__ г.
2.		протокол заседания Ученого совета № _____ от «__» ____ 20__ г.
3.		протокол заседания Ученого совета № _____ от «__» ____ 20__ г.
		протокол заседания Ученого совета № _____ от «__» ____ 20__ г.
		протокол заседания Ученого совета № _____ от «__» ____ 20__ г.

**Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Российский химико-технологический университет
имени Д.И. Менделеева»**

«УТВЕРЖДЕНО»

на заседании Ученого совета

РХТУ им. Д.И. Менделеева

протокол № 1 от «29» августа 2024 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

«Технология биологически активных веществ»

Направление подготовки 18.04.01 Химическая технология
(Код и наименование направления подготовки)

**Магистерская программа – «Химия и технология биологически
активных веществ»**
(Наименование магистерской программы)

Квалификация «магистр»

Москва 2024

Программа составлена: к.т.н., ассистентом кафедры химии и технологии органического синтеза Р.Р. Дашкиным

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры
химии и технологии органического синтеза
«26» апреля 2024 г., протокол №7

1. ЦЕЛЬ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ

Программа составлена в соответствии с требованиями Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования – магистратура по направлению подготовки **18.04.01 Химическая технология** (ФГОС ВО), рекомендациями Методической комиссии и накопленным опытом преподавания дисциплины кафедрой **Химии и технологии органического синтеза** РХТУ им. Д.И. Менделеева. Программа рассчитана на изучение дисциплины в течение одного семестров.

Дисциплина **«Технология биологически активных веществ»** относится к части дисциплин учебного плана, формируемой участниками образовательных отношений. Программа дисциплины предполагает, что обучающиеся имеют теоретическую и практическую подготовку по дисциплинам «Физическая химия», «Процессы и аппараты химической технологии», но главным образом в дисциплинах «Основы проектирования производств биологически активных веществ», «Применение САПР для проектирования производств биологически активных веществ и химико- фармацевтических средств» и «Современное технологическое и аппаратурное оформление процессов химической технологии».

Цель дисциплины – повышение научно-технической и методологической компетенций магистранта, необходимых для решения профессиональных задач, связанных с проведением научно-исследовательской работы; формирование у обучающихся систематизированных знаний о методах разработки современных инновационных химико-технологических производств по получению биологически активных веществ; ознакомление с современным уровнем развития, тенденциями развития и проблемами науки и техники в области технологии получения биологически активных веществ.

Задачи дисциплины – углубленное изучение технологических основ аппаратурного оформления и организации современных химических производств по получению биологически активных веществ;

- приобретение навыков по расчету и подбору соответствующего технологического оборудования под заданный процесс, а также составлению современных технологических схем производства по получению биологически активных веществ;

- развитию у студентов профессиональных навыков для решения конкретных практических задач.

Знания, приобретаемые студентами в процессе освоения этой дисциплины, используются студентами при выполнении курсового проекта и дипломной работы.

Дисциплина **«Технология биологически активных веществ»** преподается в 3 семестре. Контроль успеваемости студентов ведется по принятой в университете рейтинговой системе.

Рабочая программа дисциплины может быть реализована с применением электронных образовательных технологий и электронного обучения полностью или частично.

2. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Изучение дисциплины направлено на приобретение следующих **компетенций и индикаторов их достижения**:

Профессиональные компетенции и индикаторы их достижения:

Задача профессиональной деятельности	Объект или область знания	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК	Основание (профессиональный стандарт, анализ опыта) Обобщенные трудовые функции
Научно-исследовательский тип задач профессиональной деятельности				
Выполнение фундаментальных и прикладных работ поискового, теоретического и экспериментального характера с целью определения технических характеристик новой техники, а также комплекса работ по разработке технологической документации.	Химическое, химико-технологическое производство Сквозные виды профессиональной деятельности в промышленности (в сфере организации и проведения научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ в области химического и химико-технологического производства).	ПК-3. Способен применять современные приборы и методы исследования, планировать, организовывать и проводить эксперименты и испытания, корректно обрабатывать и анализировать полученные результаты	ПК-3.1. Знает экспериментальные методы и их приборное и аппаратное оформление для исследования веществ и материалов.	Профессиональный стандарт 40.011 «Специалист по научно-исследовательским и опытно-конструкторским разработкам», утвержденный приказом Министерства труда и социальной защиты Российской Федерации от 04.03.2014 № 121 н, Обобщенная трудовая функция С. Проведение научно-исследовательских и опытно-конструкторских разработок. С /01.6. Осуществление научного руководства проведением исследований по отдельным задачам (уровень квалификации – 6).
			ПК-3.2. Умеет организовывать проведение экспериментов и испытаний веществ и материалов	
			ПК-3.3. Владеет приемами обработки, анализа и представления результатов эксперимента, навыками подготовки научно-технических отчетов	
		ПК-4. Способен проводить поисковые исследования инновационных технологических процессов в области биологически активных веществ.	ПК-4.1. Знает теорию технологических процессов получения биологически активных веществ.	
			ПК-4.2. Умеет производить поисковые работы для разработки новых методов получения и анализа биологически активных веществ.	

Задача профессиональной деятельности	Объект или область знания	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК	Основание (профессиональный стандарт, анализ опыта) Обобщенные трудовые функции
			ПК-4.3. Владеет методами разработки технологий биологически активных веществ.	
		ПК-5. Способен осуществлять самостоятельные научные исследования в области химии и технологии биологически активных веществ.	ПК-5.1. Знает методы получения, особенности производства, свойства и механизмы действия биологически активных веществ различных классов.	
			ПК-5.5. Владеет навыками практической работы для осуществления научных исследований в области химии и технологии биологически активных веществ	

В результате изучения дисциплины студент магистратуры должен:

Знать:

- современные тенденции развития технологии биологически активных веществ;
- основы каталитических процессов в химии и технологии биологически активных веществ;
- принципы выбора аппаратурного оформления процессов в технологии биологически активных веществ;
- теоретические основы подготовки сырья в технологии биологически активных веществ.

Уметь:

- критически анализировать и оценивать новые и существующие научные и технологические достижения и гипотезы в химии и химической технологии биологически активных веществ;
- обосновывать выбор темы научного исследования, ставить его цели и задачи, формулировать проблему, выбирать и применять к предмету своего исследования соответствующие методы научного познания.

Владеть:

- методами синтеза биологически активных веществ;
- теоретическими основами современных методов получения биологически активных веществ;
- основами каталитических процессов в химии и технологии биологически активных веществ.

3. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Вид учебной работы	Объем дисциплины		
	ЗЕ	Акад. ч.	Астр. ч.
Общая трудоемкость дисциплины	5	180	135
Контактная работа – аудиторные занятия:	1,41	51	38,25
в том числе в форме практической подготовки	-	-	-
Лекции	0,47	17	12,75
Практические занятия (ПЗ)	0,47	17	12,75
в том числе в форме практической подготовки	0,47	17	12,75
Лабораторные работы (ЛР)	0,47	17	12,75
в том числе в форме практической подготовки	0,47	17	12,75
Самостоятельная работа	2,59	93	69,75
Контактная самостоятельная работа	2,59	0,4	0,3
Самостоятельное изучение разделов дисциплины		92,6	69,45
Вид контроля:			
Экзамен	1,00	36	27
Контактная работа – промежуточная аттестация	1,00	0,3	0,23
Подготовка к экзамену.		35,7	26,77
Вид итогового контроля:	Экзамен		

4. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

4.1. Разделы дисциплины и виды занятий

№ п/п	Раздел дисциплины	Академ. часов								
		Всего	в т.ч. в форме пр. подг.	Лекции	в т.ч. в форме пр. подг.	Прак. зан.	в т.ч. в форме пр. подг.	Лаб. работы	в т.ч. в форме пр. подг.	Сам. работа
	Введение. Основные понятия	6	-	2	-	-	-	-	-	4
1.	Раздел 1. Технологическое проектирование	44	10	5	-	5	5	5	5	29
1.1	Этапы и состав работ технологического проектирования	11	2	1	-	1	1	1	1	8
1.1	Экономические аспекты технологического проектирования	11	2	1	-	1	1	1	1	8
1.1	Комплексный подход к выбору оптимальной химической схемы синтеза	22	6	3	-	3	3	3	3	13
2.	Раздел 2. Безопасность и контроль качества при масштабировании процессов	47	12	5	-	6	6	6	6	30
2.1	Оценка безопасности процессов. Классы опасности. Критерии оценивания. Риски. Метод анализа HAZOP	33	8	3	-	4	4	4	4	22
2.2	Система менеджмента качества для производств химической продукции	14	4	2	-	2	2	2	2	8
3.	Раздел 3. Оптимизация технологических схем производства биологически активных веществ	47	12	5	-	6	6	6	6	30

3.1	Программное обеспечение для технологического проектирования	15	4	1	-	2	2	2	2	10
3.2	Проектирование химических процессов. Материальный, тепловой и энергетический балансы.	22	6	3	-	3	3	3	3	13
3.3	Оборудование для разделения веществ.	10	2-	1	-	1	1	1	1	7
	ИТОГО	144	-	17	-	17	17	17	17	93
	Экзамен	36	-	-	-	0,3	-	-	-	35,7
	ИТОГО	180								

4.2 Содержание разделов дисциплины

Введение. Основные понятия

Продукты химической промышленности. Классификация. Жизненный цикл продуктов тонкой химии на фоне других продуктов. Разработка технологии. Принципы и виды многоассортиментных заводов.

Раздел 1. Технологическое проектирование

Этапы создания производства новых продуктов тонкой химии. План разработки технологии. Этапы разработки проектов технологических установок и производств. Проектная и рабочая документация, требования к оформлению. Перечень ключевых исходных данных для технологической части проекта. Концепция модульных блоков оборудования для организации гибких производств биологически активных веществ. Выход, стоимость реагентов, риски при выборе схем синтеза продуктов. Материальный баланс. Сырьевая себестоимость.

Раздел 2. Безопасность и контроль качества при масштабировании процессов

Оценка безопасности процессов. Классы опасности. Критерии оценивания. Критические параметры процессов. Экспериментальные методы оценки критических параметров. Характеристики безопасности реакции. Прогнозирование характеристик безопасности реакции. Метод анализа HAZOP. Способы уменьшения класса опасности. Система менеджмента качества для производств химической продукции.

Раздел 3. Оптимизация технологических схем производства биологически активных веществ

Программное обеспечение для технологического проектирования. Общие вспомогательные программы для проектирования в соответствии с этапами проектирования. CAD-системы. Оптимизация работы периодических технологических схем производства биологически активных веществ. Загрузка технологического оборудования. Программные продукты для управления многоассортиментными производствами. Материальный, тепловой, энергетический балансы их взаимосвязь, связь с технологическим проектированием.

5. СООТВЕТСТВИЕ СОДЕРЖАНИЯ ТРЕБОВАНИЙ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

№	В результате освоения дисциплины студент должен:		Раздел 1	Раздел 2	Раздел 3
	Знать:				
1.	– современные тенденции развития технологии биологически активных веществ;		+	+	+
2.	– основы каталитических процессов в химии и технологии биологически активных веществ;		+	+	+
3.	– принципы выбора аппаратного оформления процессов в технологии биологически активных веществ;		+	+	+
4.	– теоретические основы подготовки сырья в технологии биологически активных веществ.		+	+	+
	Уметь:				
5.	– критически анализировать и оценивать новые и существующие научные и технологические достижения и гипотезы в химии и химической технологии биологически активных веществ.		+	+	+
6.	– обосновывать выбор темы научного исследования, ставить его цели и задачи, формулировать проблему, выбирать и применять к предмету своего исследования соответствующие методы научного познания		+	+	+
	Владеть:				
7.	– методами синтеза биологически активных веществ;		+		+
8.	– теоретическими основами современных методов получения биологически активных веществ.		+	+	+
9.	– основами каталитических процессов в химии и технологии биологически активных веществ		+	+	+
	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК			
10.	– ПК-3. Способен применять современные приборы и методы	– ПК-3.1. Знает экспериментальные методы и их приборное и аппаратное оформление для исследования веществ и материалов.	+	+	+

11.	исследования, планировать,	– ПК-3.2. Умеет организовывать проведение экспериментов и испытаний веществ и материалов.	+	+	+
12.	организовывать и проводить эксперименты и испытания, корректно обрабатывать и анализировать полученные результаты.	– ПК-3.3. Владеет приемами обработки, анализа и представления результатов эксперимента, навыками подготовки научно-технических отчетов.	+	+	+
13.	– ПК-4. Способен проводить поисковые исследования	– ПК-4.1. Знает теорию технологических процессов получения биологически активных веществ.	+	+	+
14.	инновационных технологических процессов в области биологически активных веществ.	– ПК-4.2. Умеет производить поисковые работы для разработки новых методов получения и анализа биологически активных веществ.	+	+	+
15.		– ПК-4.3. Владеет методами разработки технологий биологически активных веществ.	+	+	+
16.	– ПК-5. Способен осуществлять самостоятельные научные исследования в области химии и технологии биологически активных веществ.	– ПК-5.1. Знает методы получения, особенности производства, свойства и механизмы действия биологически активных веществ различных классов.	+	+	+
17.		– ПК-5.5. Владеет навыками практической работы для осуществления научных исследований в области химии и технологии биологически активных веществ	+	+	+

6. ПРАКТИЧЕСКИЕ И ЛАБОРАТОРНЫЕ ЗАНЯТИЯ

6.1. Практические занятия

Примерные темы практических занятий по дисциплине.

№ п/п	№ раздела дисциплины	Темы практических занятий	Часы
1	1	Этапы и состав работ технологического проектирования. Экономические аспекты технологического проектирования	2
2		Комплексный подход к выбору оптимальной химической схемы синтеза	3
3	2	Оценка безопасности процессов. Классы опасности. Критерии оценивания. Риски. Метод анализа HAZOP	4
4		Система менеджмента качества для производств химической продукции	2
5	3	Программное обеспечение для технологического проектирования. Оборудование для разделения веществ.	2
6		Проектирование химических процессов. Материальный, тепловой и энергетический балансы.	4
		Итого:	17

6.2 Лабораторные занятия

Выполнение лабораторного практикума способствует закреплению материала, изучаемого в дисциплине «*Технология биологически активных веществ*», а также дает знания о моделировании технологического процесса, материальном, тепловом и энергетическом балансе технологического процесса, классе опасности процесса. Максимальное количество баллов за выполнение лабораторного практикума составляет 20 баллов (максимально 6 баллов за лабораторную работу №1, 7 баллов за лабораторную работу №2 и №3 за каждую работу). Количество работ и баллов за каждую работу может быть изменено в зависимости от их трудоемкости.

Примеры лабораторных работ и модули, которые они охватывают

№ п/п	Раздел дисциплины	Наименование лабораторных работ	Часы
1	1	Определение класса опасности процесса. Методы понижения класса опасности.	5
2	2	Моделирование технологического процесса разделения веществ	6
3	3	Построение материального, теплового и энергетических балансов технологического процесса	6

7. САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА

Самостоятельная работа проводится с целью углубления знаний по дисциплине и предусматривает:

- регулярную проработку пройденного на лекциях и практических занятиях учебного материала;
- подготовку к контрольным работам по материалу лекционного курса;
- работа с рекомендованной учебной и научной литературой, работу с электронно-библиотечными системами, включая переводы публикаций из научных журналов, цитируемых в базах Scopus, Web of Science, Chemical Abstracts, РИНЦ;
- подготовку к сдаче экзамена по дисциплине.

Планирование времени на самостоятельную работу, необходимого на изучение дисциплины, студентам лучше всего осуществлять на весь период изучения, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала. Материал, законспектированный на лекциях, необходимо регулярно дополнять сведениями из литературных источников, представленных в рабочей программе. При работе с указанными источниками рекомендуется составлять краткий конспект материала, с обязательным фиксированием библиографических данных источника.

8. ПРИМЕРЫ ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ КОНТРОЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Совокупная оценка по дисциплине складывается из оценок за выполнение контрольных работ (максимальная оценка 40 баллов), лабораторного практикума (максимальная оценка 20 баллов) и итогового контроля в форме *экзамена* (максимальная оценка 40 баллов).

8.1. Примерная тематика реферативно-аналитической работы.

Пример задания на курсовой проект ВАРИАНТ 1

Максимальная оценка – 100 баллов.

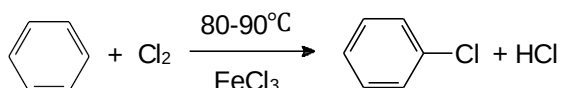
Процесс получения хлорбензола. Мощность производства 10 т/год

1. Рассчитать материальный баланс производства, тепловой баланс реакторного узла и теплообменника, ректификационную колонну и произвести механические расчеты реакторного оборудования.

2. Создать технологическую схему производства, сделать эскиз реактора и выполнить компоновочное решение.

3. Пользуясь открытыми источниками стоимости химического сырья рассчитать себестоимость продукта.

Хлорбензол получают жидкофазным хлорированием бензола элементарным хлором в колонне, заполненной насадкой из стальных и керамических колец Рашига при температуре кипения реакционной массы.



Выход продукта 92—95%.

Требования к целевому продукту и исходному сырью

Бензол– содержание C_6H_6 99.5 %, воды н/б 0.4 %.

Хлор электролизный – содержание Cl_2 75 %, H_2 2.0 %.

Хлорбензол – прозрачная бесцветная жидкость, содержание C_6H_5Cl 95 %, бензола 0.1—0.3 %, полихлоридов 0.73—1.0 %. Реакция водной вытяжки – нейтральная.

Таблица 1. Материальный баланс процесса хлорирования бензола.

Приход		Расход	
Наименование	кг/т	Наименование	кг/т
1. Стадия азеотропной осушки бензола			
1.Бензол исходный, в т.ч.:	748,0	1.Дистиллят (азеотроп), в т.ч.:	34,9
бензол	745,0	бензол	31,8
вода	3,0	вода	3,1
2.Бензол со стадии 4, в т.ч.:	1659,0	2.Куб, в т.ч.:	2435,0
бензол	1654,0	бензол	2430,0
хлорбензол	5,0	хлорбензол	5,0
3.Бензол со стадии адсорбции-конденсации абгазов	31,0		
4. Бензол со стадии осушки, в т.ч.:	31,9		
бензол	31,8		
вода	0,1		
Итого:	2469,9	Итого:	2469,9
2. Стадия хлорирования			
1. Газообразный хлор, в т.ч.:	815,0	1. Хлорированная жидкость, в т.ч.:	2714,5
хлор	652,0	бензол	1662,0
инерты	163,0	хлорбензол	1015,0
2. Сухой бензол, в т.ч.:	2435,0	полихлориды	35,0
бензол	2430,0	хлористый водород	2,5
хлорбензол	5,0	2. Абгазы, в т.ч.:	1929,5
3. Бензол кислый абгазный, в т.ч.:	1399,0	бензол	805,0
бензол	767,0	хлорбензол	615,0
хлорбензол	615,0	инерты	163,0
хлористый водород	17,0	хлористый водород	346,5
Итого:	4649,0	3. Потери (хлор)	5,0
		Итого:	4649,0
3. Стадия нейтрализации хлорированной жидкости			
1.Хлорированная жидкость, в т.ч.:	2714,5	1. Органический слой, в т.ч.:	2708,0
бензол	1662,0	бензол	1660,0
хлорбензол	1020,0	хлорбензол	1013,0
полихлориды	35,0	полихлориды	35,0
хлористый водород	2,5	2.Водный слой, в т.ч.:	606,5

2.Водный раствор NaOH (40 %), в т.ч.:	600,0	вода	361,2
вода	360,0	NaOH	237,3
NaOH	240,0	NaCl	4,0
		бензол	2,0
		хлорбензол	2,0
Итого:	3314,5	Итого:	3314,5
4. Стадия обезбензоливания			
Нейтральная хлорированная жидкость со стадии 3, в т.ч.:	2708,0	1. Дистиллят-бензол, в т.ч.:	1659,0
бензол	1660,0	бензол	1654,0
хлорбензол	1013,0	хлорбензол	5,0
полихлориды	35,0	2. Кубовый хлорбензол- сырец, в т.ч.:	1042,0
		хлорбензол	1007,0
		полихлориды	35,0
		3. Потери, в т.ч.:	7,0
		бензол	6,0
		хлорбензол	1,0
Итого:	2708,0	Итого:	2708,0
5. Стадия перегонки хлорбензола-сырца			
1.Хлорбензол (сырец), в т.ч.:	1042,0	1. Дистиллят-хлорбензол, в т.ч.:	1000,0
хлорбензол	1007,0	хлорбензол	998,5
полихлориды	35,0	полихлориды	1,5
		2. Кубовые полихлориды	36,5
		3.Потери, в т.ч.:	5,5
		хлорбензол	5,0
		полихлориды	0,5
Итого:	1042,0	Итого:	1042,0
6. Стадия абсорбции хлористого водорода			
1.Хлористый водород со стадии 2, в т.ч.:	530,5	1. Соляная кислота 27,5%, в т.ч.:	1203,0
хлористый водород	329,5	вода	870,0
бензол	38,0	хлористый водород	328,0
инерты	163,0	бензол	5,0
2.Вода	931,0	2. Хвостовые абгазы, в т.ч.:	258,5
		водяной пар	61,0
		хлористый водород	1,5
		инерты	163,0
		пары бензола	33,0
Итого:	1461,5	Итого:	1461,5
7. Стадия конденсации абгазов			
1.Хвостовые абгазы, в т.ч.:	258,5	1.Конденсат, в т.ч.:	89,0
водяной пар	61,0	бензол	31,0

хлористый водород	1,5	вода	57,0
инерты	163,0	хлористый водород	1,0
пары бензола	33,0	2.Пары (сброс):	169,5
		инерты	163,0
		пары воды	4,0
		пары бензола	2,0
		хлористый водород	0,5
Итого:	258,5	Итого:	258,5

Рецикл со стадии 3 не учтен в материальном балансе.

Примеры тем курсового проекта

1. Производство уксусной кислоты по методу BASF Process с использованием катализатора Cobalt-catalyzed производительностью 2000 т/год.
2. Производство уксусной кислоты по методу Monsanto process с использованием катализатора Rhodium-catalyzed производительностью 2000 т/год.
3. Производство уксусной кислоты по методу Liquid-phase oxidation с использованием катализатора Manganese или cobalt производительностью 2000 т/год.
4. Производство уксусной кислоты по методу BP с использованием катализатора Iridium-catalyzed methanol carbonylation производительностью 2000 т/год.
5. Производство уксусной кислоты по методу BASF Process с использованием катализатора Cobalt-catalyzed производительностью 3000 т/год.
6. Производство уксусной кислоты по методу Monsanto process с использованием катализатора Rhodium-catalyzed производительностью 3000 т/год.
7. Производство уксусной кислоты по методу Liquid-phase oxidation с использованием катализатора Manganese или cobalt производительностью 3000 т/год.
8. Производство уксусной кислоты по методу BP с использованием катализатора Iridium-catalyzed methanol carbonylation производительностью 3000 т/год.
9. Производство уксусной кислоты по методу BASF Process с использованием катализатора Cobalt-catalyzed производительностью 4000 т/год.
10. Производство уксусной кислоты по методу Monsanto process с использованием катализатора Rhodium-catalyzed производительностью 4000 т/год.
11. Производство уксусной кислоты по методу Liquid-phase oxidation с использованием катализатора Manganese или cobalt производительностью 4000 т/год.
12. Производство уксусной кислоты по методу BP с использованием катализатора Iridium-catalyzed methanol carbonylation производительностью 4000 т/год.
13. Производство уксусной кислоты по методу BASF Process с использованием катализатора Cobalt-catalyzed производительностью 5000 т/год.
14. Производство уксусной кислоты по методу Monsanto process с использованием катализатора Rhodium-catalyzed производительностью 5000 т/год.
15. Производство уксусной кислоты по методу Liquid-phase oxidation с использованием катализатора Manganese или cobalt производительностью 5000 т/год.
16. Производство уксусной кислоты по методу BP с использованием катализатора Iridium-catalyzed methanol carbonylation производительностью 5000 т/год.
17. Производство уксусной кислоты по методу BASF Process с использованием катализатора Cobalt-catalyzed производительностью 10000 т/год.
18. Производство уксусной кислоты по методу Monsanto process с использованием катализатора Rhodium-catalyzed производительностью 10000 т/год.
19. Производство уксусной кислоты по методу Liquid-phase oxidation с использованием катализатора Manganese или cobalt производительностью 10000 т/год.

20. Производство уксусной кислоты по методу ВР с использованием катализатора Iridium-catalyzed methanol carbonylation производительностью 10000 т/год.
21. Производство уксусной кислоты по методу BASF Process с использованием катализатора Cobalt-catalyzed производительностью 15000 т/год.
22. Производство уксусной кислоты по методу Monsanto process с использованием катализатора Rhodium-catalyzed производительностью 15000 т/год.
23. Производство уксусной кислоты по методу Liquid-phase oxidation с использованием катализатора Manganese или cobalt производительностью 15000 т/год.
24. Производство уксусной кислоты по методу ВР с использованием катализатора Iridium-catalyzed methanol carbonylation производительностью 15000 т/год.
25. Производство уксусной кислоты по методу BASF Process с использованием катализатора Cobalt-catalyzed производительностью 20000 т/год.
26. Производство уксусной кислоты по методу Monsanto process с использованием катализатора Rhodium-catalyzed производительностью 20000 т/год.
27. Производство уксусной кислоты по методу Liquid-phase oxidation с использованием катализатора Manganese или cobalt производительностью 20000 т/год.
28. Производство уксусной кислоты по методу ВР с использованием катализатора Iridium-catalyzed methanol carbonylation производительностью 20000 т/год.
29. Производство метилендифенилдиизоцианата производительностью 2000 т/год.
30. Производство метилендифенилдиизоцианата производительностью 3000 т/год.
31. Производство метилендифенилдиизоцианата производительностью 4000 т/год.
32. Производство метилендифенилдиизоцианата производительностью 5000 т/год.
33. Производство метилендифенилдиизоцианата производительностью 10000 т/год.
34. Производство метилендифенилдиизоцианата производительностью 15000 т/год.
35. Производство метилендифенилдиизоцианата производительностью 20000 т/год.
36. Производство метилизоцианата производительностью 2000 т/год.
37. Производство метилизоцианата производительностью 3000 т/год.
38. Производство метилизоцианата производительностью 4000 т/год.
39. Производство метилизоцианата производительностью 5000 т/год.
40. Производство метилизоцианата производительностью 10000 т/год.
41. Производство метилизоцианата производительностью 15000 т/год.
42. Производство метилизоцианата производительностью 20000 т/год.
43. Производство толуилендиизоцианата производительностью 2000 т/год.
44. Производство толуилендиизоцианата производительностью 3000 т/год.
45. Производство толуилендиизоцианата производительностью 4000 т/год.
46. Производство толуилендиизоцианата производительностью 5000 т/год.
47. Производство толуилендиизоцианата производительностью 10000 т/год.
48. Производство толуилендиизоцианата производительностью 15000 т/год.
49. Производство толуилендиизоцианата производительностью 20000 т/год.
50. Производство толуилендиизоцианата производительностью 30000 т/год.

Требования к выполнению проекта

Расчёт и обоснование проекта получения требуемого продукта с требуемой производительностью с расчётом операционных и капитальных затрат, включающий следующие разделы:

1. Введение
2. Технологическая часть
 - 2.1. Научно-технические основы проектируемого производства
 - 2.2. Характеристика сырья, вспомогательных материалов, продуктов производства и энергетических средств.
 - 2.3. Технологическая схема с описанием, разработанная в ChemCAD

- 2.4. Материальный баланс
- 2.5. Технологический расчет реактора синтеза
 - 2.5.1 Кинетика
 - 2.5.2 Теплообмен
- 2.6. Конструктивно-механические расчеты
 - 2.6.1 Расчет основных характеристик выбранного реактора.
- 2.7. Контроль производства
 - 2.7.1 Аналитический контроль
 - 2.7.2 Система контрольно-измерительных приборов
 - 2.7.3 Система средств регулирования
- 3. Экономические расчёты
 - 3.1. Себестоимость продукта, операционные затраты, включая затраты на сырьё, электроэнергию, тепло и фонд оплаты труда.
 - 3.2. Капитальные затраты, включая оборудование
 - 3.3. Срок окупаемости

Приложение А

- 1. Технологическая схема принципиальная.
- 2. Программа расчёта в ChemCAD.
- 3. Программа расчёта в MS Excel.
- 4. Презентация.

Различные разделы курсового проекта оцениваются в соответствии с нижеследующей таблицей при суммарных максимальных 100 баллов.

Раздел	2.1	2.2	2.3	2.4	2.5	2.6	2.7	3	A1	A4	Доклад	Ответы на вопросы	ИТОГО:
Баллы	3	3	10	10	10	5	4	5	8	2	20	20	100

8.2. Примеры контрольных вопросов для текущего контроля освоения дисциплины

Для текущего контроля предусмотрено 3 контрольных работы (по одной контрольной работе по каждому разделу). Максимальная оценка за контрольные работы №1, №2 и №3 (3 семестр) составляет 20, 10 и 10 баллов за каждую работу.

Раздел	Контрольные вопросы
Раздел 1. Технологическое проектирование	1. Этапы создания производства новых продуктов тонкой химии. 2. План разработки технологии. 3. Этапы разработки проектов технологических установок и производств. 4. Проектная и рабочая документация, требования к оформлению. 5. Перечень ключевых исходных данных для технологической части проекта 6. Концепция модульных блоков оборудования для организации гибких производств биологически активных веществ 7. Выход, стоимость реагентов, риски при выборе схем синтеза продуктов 8. Материальный баланс. 9. Сырьевая себестоимость.
Раздел 2. Безопасность и	1. Оценка безопасности процессов. 2. Классы опасности.

контроль качества при масштабировании процессов	3. Критерии оценивания опасности процессов 4. Критические параметры процессов. 5. Экспериментальные методы оценки критических параметров. 6. Характеристики безопасности реакции. 7. Прогнозирование характеристик безопасности реакции. 8. Метод анализа HAZOP. 9. Способы уменьшения класса опасности. 10. Система менеджмента качества для производств химической продукции.
Раздел 3. Оптимизация технологических схем производства биологически активных веществ.	1. Программное обеспечение для технологического проектирования. 2. Общие вспомогательные программы для проектирования в соответствии с этапами проектирования. 3. САД-системы. 4. Оптимизация работы периодических технологических схем производства биологически активных веществ 5. Загрузка технологического оборудования. 6. Программные продукты для управления многоассортиментными производствами. 7. Материальный, тепловой, энергетический балансы их взаимосвязь, связь с технологическим проектированием.

Раздел 1. Примеры вопросов к контрольной работе № 1. Максимальная оценка – 20 баллов. Контрольная работа содержит 2 вопроса, по 10 баллов за вопрос.

Вариант 1

1. Этапы разработки проектов технологических установок и производств.
2. Выполнить подбор схемы синтеза 2,2',2'',2'''-(3,6,9,12-тетрааза-1(2,6)-пиридинациклотридекафан-3,6,9,12-тетраил) тетрауксусной кислоты

Раздел 2. Примеры вопросов к контрольной работе № 2. Максимальная оценка – 10 баллов. Контрольная работа содержит 2 вопроса, по 5 баллов за вопрос.

Вариант 1

1. Система менеджмента качества для производств химической продукции.
2. Задача по промышленной безопасности

В реакторе периодического типа действия проводят две различные реакции. Первая реакция – гидрирование карбонильной группы сахара в водородом в изопропиловом спирте при давлении водорода в 4 бара и температуре 80°C. Энтальпия реакции составляет 350 кДж/моль, плотность РМ 780 кг/м³, начальная концентрация сахара в РМ составляет 1 моль/л, теплоемкость реакционной массы – 3 кДж/кг·К, энергия активации для основной реакции – 50 кДж/моль, энергия активации побочной реакции разложения 30 кДж/моль, максимальные скорости тепловыделения для основной и побочной реакции соответственно 3 и 40 Вт/кг. Общая теплота разложения составляет 210 кДж/кг и TD24 = 170°C.

Вторая реакция – ацилирование ароматического соединения при помощи прикапывания раствора хлорацетилхлорида в хлороформе при давлении в системе 1.5 бара и температуре 10°C. Максимальная степень накопления во время реакции составляет 35%. Общая теплота реакции составляет 147 кДж/кг, плотность РМ 1500 кг/м³, теплоемкость реакционной массы – 0,95 кДж/кг·К, энергия активации для основной реакции – 37 кДж/моль, энергия активации побочной реакции разложения 25 кДж/моль, максимальные скорости

тепловыделения для основной и побочной реакции соответственно 5 и 25 Вт/кг. Общая теплота разложения составляет 89 кДж/кг и $TD_{24} = 50^{\circ}\text{C}$.

Построить график и определить класс опасности. Предложить варианты понижения класса опасности до 1-2 уровня. Изобразить схематически полученные ситуации (график температур процесса в соответствии с классом опасности). Определить конечную температуру процесса разложения. Определить время достижения максимальной скорости основной и побочных реакций.

Реактор оснащен двумя предохранительными мембранами на 5 и 2 бар, которые переключаются в зависимости от реакции. Предложить и обосновать схему подключения мембран с реактором.

Систему считать адиабатической

Давление, бар	Температура кипения, $^{\circ}\text{C}$	
	Изопропанол	Хлороформ
1	82,1	60,7
2	100,9	83,6
3	113,1	98,8
4	122,4	110,4
5	130,0	120,1

Раздел 3. Примеры вопросов к контрольной работе № 3. Максимальная оценка – 10 баллов. Контрольная работа содержит 2 вопроса, по 5 баллов за вопрос.

Вариант 1

1. Оптимизация работы периодических технологических схем производства биологически активных веществ
2. Составить материальный и тепловой балансы для процесса получения этилгексилового эфира 2,4-дихлорфеноксисукусной кислоты мощностью 5000 т/год.

Примеры контрольных вопросов к лабораторным работам

Лабораторная работа № 1.

1. Оценка безопасности процессов. Классы опасности. Критерии оценивания опасности процессов. Критические параметры процессов.
2. Экспериментальные методы оценки критических параметров процесса.
3. Техника проведения эксперимента.
4. Обработка полученных данных и определение скорости тепловыделения.
5. Методы понижения класса опасности.
6. Техника безопасности при выполнении работы, правила работы с используемыми реагентами.

Лабораторная работа № 2.

1. Программы, используемые для моделирования технологических процессов.
2. Математические модели, используемые при расчете процессов разделения.
3. Алгоритм расчета процессов разделения.
4. Методы оптимизации процессов разделения.
5. Техника безопасности при выполнении работы.

Лабораторная работа № 3.

1. Материальный баланс. Алгоритм расчета. Взаимосвязь технологических операций в материальном балансе.
2. Тепловой баланс. Алгоритм расчета. Программы, используемые для расчета тепловых балансов.
3. Энергетический баланс. Алгоритм расчета. Программы, используемые для расчета энергетических балансов.
4. Взаимосвязь материального, теплового и энергетического балансов.
5. Оптимизация технологической схемы на основе материального и теплового балансов.
6. Техника безопасности при выполнении работы.

8.3. Вопросы для итогового контроля освоения дисциплины (3 семестр – экзамен).

Экзаменационный билет включает контрольные вопросы по разделам 1, 2 и 3 рабочей программы дисциплины и содержит 2 вопроса.

1 вопрос – 20 баллов, вопрос 2 – 20 баллов.

8.3.1. Примеры контрольных вопросов для итогового контроля освоения дисциплины (3 семестр – экзамен).

Примеры теоретических вопросов:

1. Разработка технологии. Многоассортиментные заводы.
2. Технологическое проектирование. Этапы и состав работ. Экономические аспекты проектирования.
3. Оценка химической схемы синтеза. Критерии сравнения.
4. Оценка безопасности процессов. Классы опасности. Критерии оценивания. Примеры.
5. Оценка безопасности процессов. Классы опасности. Способы уменьшения класса опасности. Риски. Примеры.
6. Оценка безопасности процессов. Метод анализа HAZOP. Примеры.
7. Программное обеспечение для проектирования. Общие вспомогательные программы для проектирования в соответствии с этапами проектирования. CAD-системы. Примеры. Сравнение.
8. Проектирование химического процесса. Этапы проведения процесса. Материальный, тепловой, энергетический балансы, их взаимосвязь с проектом и между собой. Материалы и гидравлические особенности при выборе оборудования.
9. Оборудование для разделения веществ. Особенности. Сравнение. Выбор сепараторов.
10. Система менеджмента качества для производств химической продукции.

Пример экзаменационной задачи:

Вариант 1

В реакторе периодического типа действия проводят реакцию получения хлорангидрида из ацетоксиуксусной кислоты. Реакцию проводят при помощи дозирования тионилхлорида в реактор поддерживая температуру реакционной массы ниже 30°C. Максимальная степень накопления во время реакции составляет 40%. Систему считать адиабатической.

Параметры реактора:

- объём реактора 3,0 м³,
- давление в реакторе..... 1 атм,

Масса загружаемых веществ:

- ацетоксиуксусная кислота.....197, кг,
- хлористый метилен 1866, кг,
- триэтиламин.....337, кг
- тионилхлорид 573, кг,
- вода 30, кг,

Параметры реакционной массы:

- энтальпия реакции.....250 кДж/моль,
- плотность реакционной массы.....1326, кг,
- теплоемкость реакционной массы.....1,185, кДж/кг·К
- начальная концентрация исходной кислоты 0,693 моль/л,
- температура при которой происходит полное разложение за 24 часа 60, °С,
- общая теплота разложения.....89, кДж/кг,
- температура кипения хлористого метилена 43, °С,

Результаты синтезов:

№ загрузки	1	2	3	4	5	6
Выход, %	94	94	95	96	93	94
Время, ч	30	32	31	30	27	31
Качество	Q1	Q2	Q1	Q1	Q3	Q1

Задание:

1. Рассчитать показатели процесса (AE, VTO, E-factor, PMI, QSL, PEI_{выхода}, PEI_{времени}). **(4 балла).**
2. Построить график температур процесса и определить класс опасности. Определить конечную температуру разложения. **(4 балла).**
3. Предложить вариант понижения класса опасности до 1-2 уровня, построить график температур для полученной ситуации. Определить конечную температуру разложения. **(4 балла).**
4. Предложить обвязку реактора и систему регулирования для данного процесса. **(4 балла).**
5. Перечислить возможные отклонения во время проведения процесса и способы их устранения или уменьшения вероятности возникновения. **(4 балла).**

Фонд оценочных средств приведен в виде отдельного документа, являющегося неотъемлемой частью основной образовательной программы.

8.4. Структура и примеры билетов для экзамена (3 семестр).

Экзамен по дисциплине «*Технология биологически активных веществ*» проводится в 3 семестре и включает контрольные вопросы по разделам 1-3 рабочей программы дисциплины. Билет для **экзамена** состоит из 2 вопросов, относящихся к указанным разделам.

Пример билета для **экзамена**:

«Утверждаю» _____ (Должность, наименование кафедры) _____ С.В. Попков	Министерство науки и высшего образования РФ
	Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева
	Кафедра химии и технологии органического синтеза

(Подпись) _____ (И. О. Фамилия) «__» _____ 20__ г.	18.04.01 Химическая технология Магистерская программа – «Химия и технология биологически активных веществ» Технология биологически активных веществ

Билет № 1

1. Оценка химической схемы синтеза. Критерии сравнения.

2. В реакторе периодического типа действия проводят реакцию получения хлорангидрида из ацетоксиуксусной кислоты. Реакцию проводят при помощи дозирования тионилхлорида в реактор поддерживая температуру реакционной массы ниже 30°C. Максимальная степень накопления во время реакции составляет 40%. Систему считать адиабатической.

Параметры реактора:

- объём реактора 3,0 м³,
- давление в реакторе..... 1 атм,

Масса загружаемых веществ:

- ацетоксиуксусная кислота..... 197, кг,
- хлористый метилен 1866, кг,
- триэтиламин..... 337, кг
- тионилхлорид 573, кг,
- вода 30, кг,

Параметры реакционной массы:

- энтальпия реакции..... 250 кДж/моль,
- плотность реакционной массы..... 1326, кг,
- теплоемкость реакционной массы 1,185, кДж/кг·К
- начальная концентрация исходной кислоты 0,693 моль/л,
- температура при которой происходит полное разложение за 24 часа 60, °С,
- общая теплота разложения..... 89, кДж/кг,
- температура кипения хлористого метилена 43, °С,

Результаты синтезов:

№ загрузки	1	2	3	4	5	6
Выход, %	94	94	95	96	93	94
Время, ч	30	32	31	30	27	31
Качество	Q1	Q2	Q1	Q1	Q3	Q1

Задание:

1. Рассчитать показатели процесса (AE, VTO, E-factor, PMI, QSL, PEI_{выхода}, PEI_{времени}). **(4 балла).**
2. Построить график температур процесса и определить класс опасности. Определить конечную температуру разложения. **(4 балла).**
3. Предложить вариант понижения класса опасности до 1-2 уровня, построить график температур для полученной ситуации. Определить конечную температуру разложения. **(4 балла).**
4. Предложить обвязку реактора и систему регулирования для данного процесса. **(4 балла).**
5. Перечислить возможные отклонения во время проведения процесса и способы их устранения или уменьшения вероятности возникновения. **(4 балла)**

9. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

9.1.Рекомендуемая литература

А. Основная литература

1. Комиссаров, Ю. А. Процессы и аппараты химической технологии/ Ю. А. Комиссаров, Л. С. Гордеев, Д. П. Вент. - М.: Химия, 2011. – 1229 с.
2. Баранов Д.А. Процессы и аппараты химической технологии/ Баранов Д.А., — Санкт-Петербург: Лань, 2016. — 408 с.
3. Химическая технология лекарственных веществ. Основные процессы химического синтеза биологически активных веществ [Электронный ресурс] : учебное пособие / А.А. Иозеп [и др.] ; под ред. Иозеп А.А.. — Электрон. дан. — Санкт-Петербург : Лань, 2017. — 356 с.

Б. Дополнительная литература

1. Мельников Н.Н. Пестициды. Химия, технология и применение. / Н.Н. Мельников // М.: Химия, 1987. - 712 с.

9.2. Рекомендуемые источники научно-технической информации

- Раздаточный иллюстративный материал к лекциям.
- Презентации к лекциям.
- Методические рекомендации по выполнению лабораторных работ.

Научно-технические журналы:

- «Химико-фармацевтический журнал» ISSN 0023-1134
- Журнал «Кинетика и катализ» ISSN 0453-8811
- Журнал «Химическая промышленность сегодня» ISSN 0023-110X
- Журнал «Фармацевтическая промышленность»

Ресурсы информационно–телекоммуникационной сети Интернет (*при необходимости*):

- <https://gmpnews.ru/>
- <http://www.remedium.ru/>

9.3. Средства обеспечения освоения дисциплины

Для реализации рабочей программы подготовлены следующие средства обеспечения освоения дисциплины:

- компьютерные презентации интерактивных лекций – по 3 разделам дисциплины, (общее число слайдов – 486);

Для реализации учебной программы с использованием электронного обучения (ЭО) и дистанционных образовательных технологий (ДОТ) применяются следующие образовательные технологии и средства обеспечения дисциплины:

- ЕИОС РХТУ им. Д.И. Менделеева;
- платформы для проведения онлайн конференций (Zoom, Skype и др.);
- сервисы по доставки e-mail сообщений.

Для проведения промежуточных и итоговой аттестации могут использоваться такие сервисы как: Яндекс.Формы, Zoom, Skype, отдельные специализированные модули LMS.

10. ПЕРЕЧЕНЬ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ В ОБРАЗОВАТЕЛЬНОМ ПРОЦЕССЕ

Информационную поддержку изучения дисциплины осуществляет Информационно-библиотечный центр (ИБЦ) РХТУ им. Д.И. Менделеева, который обеспечивает обучающихся основной учебной, учебно-методической и научной литературой, необходимой для организации образовательного процесса по дисциплине. Общий объем многоотраслевого фонда ИБЦ на 01.01.2024 составляет 1 559 436 экз.

Фонд ИБЦ располагает учебной, учебно-методической и научно-технической литературой в форме печатных и электронных изданий, а также включает официальные, справочно-библиографические, специализированные отечественные и зарубежные периодические и информационные издания. ИБЦ обеспечивает доступ к профессиональным базам данных, информационным, справочным и поисковым системам.

Каждый обучающийся обеспечен свободным доступом из любой точки, в которой имеется доступ к сети Интернет и к электронно-библиотечной системе (ЭБС) Университета, которая содержит различные издания по основным изучаемым дисциплинам и сформирована по согласованию с правообладателями учебной и учебно-методической литературы.

Для более полного и оперативного справочно-библиографического и информационного обслуживания в ИБЦ реализована технология Электронной доставки документов.

Полный перечень электронных информационных ресурсов, используемых в процессе обучения, представлен в основной образовательной программе.

11. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

В соответствии с учебным планом занятия по дисциплине «*Технология биологически активных веществ*» проводятся в форме лекций, практических, лабораторных занятий и самостоятельной работы обучающегося.

11.1. Оборудование, необходимое в образовательном процессе:

Лекционная учебная аудитория, оборудованная электронными средствами демонстрации (компьютер со средствами звуковоспроизведения, проектор, экран) и учебной мебелью.

Библиотека, имеющая рабочие места, оснащенные компьютерами с доступом к базам данных и выходом в Интернет.

Лаборатория для проведения лабораторных работ, оборудованная, лабораторной мебелью, лабораторной посудой.

11.2. Учебно-наглядные пособия:

Учебные пособия по дисциплине.

Раздаточный материал к разделам дисциплины.

Раздаточный материал к практическим занятиям по дисциплине. Электронные презентации к разделам дисциплины.

Справочные материалы в печатном и электронном виде.

11.3. Компьютеры, информационно-телекоммуникационные сети, аппаратно-программные и аудиовизуальные средства:

Персональные компьютеры, укомплектованные проигрывателями CD и DVD, принтерами и программными средствами.

Проекторы и экраны.

Копировальные аппараты.

Локальная сеть с выходом в Интернет.

Мультимедийный проектор в комплекте с ноутбуком, Оверхед проектор Medium 524 Р 3-х линзовый.

11.4. Печатные и электронные образовательные и информационные ресурсы:

Информационно-методические материалы: учебные пособия по дисциплине; раздаточный материал к разделам лекционного курса; альбомы и рекламные проспекты с основными видами и характеристиками полимерных материалов.

11.5. Перечень лицензионного программного обеспечения:

Полный перечень лицензионного программного обеспечения представлен в основной образовательной программе.

№ п.п.	Наименование программного продукта	Реквизиты договора поставки	Срок окончания действия лицензии
1.	WINDOWS 8.1 Professional Get Genuine	Контракт № 62-64ЭА/2013 от 02.12.2013	бессрочно
2.	Micosoft Office Standard 2013	Контракт № 62-64ЭА/2013 от 02.12.2013	бессрочная
3.	WINHOME 10 Russian OLV NL Each AcademicEdition	Контракт № 28-35ЭА/2020 от 26.05.2020	бессрочно
4.	Microsoft Office Standard 2019 В составе: • Word • Excel • Power Point • Outlook	Контракт №175- 262ЭА/2019 от 30.12.2019	12 месяцев (ежегодное продление подписки с правом перехода на обновлённую версию продукта)
5.	Kaspersky Endpoint Security для бизнеса – Стандартный Russian Edition.	Договор № 99-155ЭА-223/2024	12 месяцев (ежегодное продление подписки с правом перехода на обновлённую версию продукта)

12. ТРЕБОВАНИЯ К ОЦЕНКЕ КАЧЕСТВА ОСВОЕНИЯ ПРОГРАММЫ

Наименование разделов	Основные показатели оценки	Формы и методы контроля и оценки
Раздел 1. Технологическое проектирование	<i>Знать:</i> –современные тенденции развития технологии биологически активных веществ; –принципы выбора аппаратного оформления процессов в технологии биологически активных веществ; –принципы и методы оптимизации процессов в технологии биологически активных веществ; –физико-химические основы современных и перспективных технологий биологически активных веществ; <i>Уметь:</i> –составлять и анализировать технологические схемы основных процессов в технологии биологически активных веществ, а также оптимизировать и оценивать их эффективность. –рассчитывать, оценивать и находить оптимальное технологическое решение с требуемыми характеристиками для конкретных процессов в технологии биологически активных веществ – критически анализировать и оценивать новые и существующие научные и технологические достижения и гипотезы в химии и химической технологии биологически активных веществ <i>Владеть:</i> –методами оценки и расчета основного технологического оборудования производств биологически активных веществ; –принципами разработки современного оборудования производств биологически активных веществ.	Оценка за контрольную работу №1 (3 семестр) Оценка за лабораторную работу №1 (3 семестр) Оценка за экзамен (3 семестр)
Раздел 2. Безопасность и контроль качества при масштабировании процессов	<i>Знать:</i> –современные тенденции развития технологии биологически активных веществ; –принципы выбора аппаратного оформления процессов в технологии биологически активных веществ; –принципы и методы оптимизации процессов в технологии биологически активных веществ; –физико-химические основы современных и перспективных технологий биологически активных веществ; <i>Уметь:</i> –составлять и анализировать технологические схемы основных процессов в технологии биологически активных веществ, а также оптимизировать и оценивать их эффективность.	Оценка за контрольную работу №2 (3 семестр) Оценка за лабораторную работу №2 (3 семестр) Оценка за экзамен (3 семестр)

	–рассчитывать, оценивать и находить оптимальное технологическое решение с требуемыми характеристиками для конкретных процессов в технологии биологически активных веществ – критически анализировать и оценивать новые и существующие научные и технологические достижения и гипотезы в химии и химической технологии биологически активных веществ <i>Владеть:</i> –методами оценки и расчета основного технологического оборудования производств биологически активных веществ; –принципами разработки современного оборудования производств биологически активных веществ.	
Раздел 3. Оптимизация технологических схем	<i>Знать:</i> –современные тенденции развития технологии биологически активных веществ; –принципы выбора аппаратного оформления процессов в технологии биологически активных веществ; –принципы и методы оптимизации процессов в технологии биологически активных веществ; –физико-химические основы современных и перспективных технологий биологически активных веществ; <i>Уметь:</i> –составлять и анализировать технологические схемы основных процессов в технологии биологически активных веществ, а также оптимизировать и оценивать их эффективность. –рассчитывать, оценивать и находить оптимальное технологическое решение с требуемыми характеристиками для конкретных процессов в технологии биологически активных веществ – критически анализировать и оценивать новые и существующие научные и технологические достижения и гипотезы в химии и химической технологии биологически активных веществ <i>Владеть:</i> –методами оценки и расчета основного технологического оборудования производств биологически активных веществ; –принципами разработки современного оборудования производств биологически активных веществ.	Оценка за Контрольную работу №3 (3 семестр) Оценка за лабораторную работу №3 (3 семестр) Оценка за экзамен (3 семестр)

13. ОСОБЕННОСТИ ОРГАНИЗАЦИИ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО ПРОЦЕССА ДЛЯ ИНВАЛИДОВ И ЛИЦ С ОГРАНИЧЕННЫМИ ВОЗМОЖНОСТЯМИ ЗДОРОВЬЯ

Обучение инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья осуществляется в соответствии с:

- Порядком организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры (Приказ Министерства науки и высшего образования Российской Федерации от 06.04.2021 № 245);

- Положением о порядке организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева», принятым решением Ученого совета РХТУ им. Д.И. Менделеева от 28.12.2022, протокол № 5;

- Методическими рекомендациями по организации образовательного процесса для обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья в образовательных организациях высшего образования, в том числе оснащённости образовательного процесса (утверждены заместителем Министра образования и науки РФ А.А. Климовым от 08.04.2014 № АК-44/05вн).

**Дополнения и изменения к рабочей программе дисциплины
«Технология биологически активных веществ»**

основной образовательной программы

Направление подготовки 18.04.01 – Химическая технология
Магистерская программа «Химия и технология биологически активных веществ»

Форма обучения: очная

Номер изменения/ дополнения	Содержание дополнения/изменения	Основание внесения изменения/дополнения
1.		протокол заседания Ученого совета № _____ от «___» _____ 20__ г.
		протокол заседания Ученого совета № _____ от «___» _____ 20__ г.
		протокол заседания Ученого совета № _____ от «___» _____ 20__ г.
		протокол заседания Ученого совета № _____ от «___» _____ 20__ г.
		протокол заседания Ученого совета № _____ от «___» _____ 20__ г.

**Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Российский химико-технологический университет
имени Д.И. Менделеева»**

«УТВЕРЖДЕНО»

на заседании Ученого совета

РХТУ им. Д.И. Менделеева

протокол № 1 от «29» августа 2024 г..

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

«Хемоинформатика»

Направление подготовки 18.04.01 Химическая технология
(Код и наименование направления подготовки)

**Магистерская программа – «Химия и технология биологически активных
веществ»**
(Наименование магистерской программы)

Квалификация «магистр»

Москва 2024

Программа составлена: к.х.н., доцентом кафедры химии и технологии органического синтеза Е.В. Радченко; к.х.н., доцентом, заведующим кафедрой химии и технологии органического синтеза С.В. Попковым;

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры химии и технологии органического синтеза

«26» апреля 2024 г., протокол №7

1. ЦЕЛЬ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ

Программа составлена в соответствии с требованиями Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования – магистратура по направлению подготовки **18.04.01 Химическая технология** (ФГОС ВО), рекомендациями Методической комиссии и накопленным опытом преподавания дисциплины кафедрой **Химии и технологии органического синтеза** РХТУ им. Д.И. Менделеева. Программа рассчитана на изучение дисциплины в течение одного семестра.

Дисциплина **«Хемоинформатика»** относится к части дисциплин учебного плана, формируемой участниками образовательных отношений. Программа дисциплины предполагает, что обучающиеся имеют теоретическую и практическую подготовку в области изучения дисциплин: «Органическая химия», «Основы биохимии», «Химия и технология биологически активных веществ», «Квантовая химия».

Цель дисциплины – формирование у обучающихся систематизированных знаний о современных методах хемоинформатики, повышение профессиональных компетенций в области компьютерного анализа и моделирования химической информации, получение навыков в интерпретации результатов химических исследований, проведенных с применением компьютерного анализа и моделирования.

Задачи дисциплины –

- - изучить принципы компьютерного моделирования связи структуры и активности лекарственных веществ, конструирования и оптимизации структур с заданной физиологической активностью;
- - освоить систематизированные подходы к анализу связи структуры и активности и конструированию структур с заданной физиологической активностью;
- сформировать практические навыки компьютерной обработки и анализа химической информации.

Дисциплина **«Хемоинформатика»** преподается во 2 семестре. Контроль успеваемости студентов ведется по принятой в университете рейтинговой системе.

Рабочая программа дисциплины может быть реализована с применением электронных образовательных технологий и электронного обучения полностью или частично.

2. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Изучение дисциплины направлено на приобретение следующих **компетенций и индикаторов их достижения:**

Профессиональные компетенции и индикаторы их достижения:

Задача профессиональной деятельности	Объект или область знания	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК	Основание (профессиональный стандарт, анализ опыта) Обобщенные трудовые функции
Научно-исследовательский тип задач профессиональной деятельности				
Выполнение фундаментальных и прикладных работ поискового, теоретического и экспериментального характера с целью определения технических характеристик новой техники, а также комплекса работ по разработке технологической документации.	Химическое, химико-технологическое производство Сквозные виды профессиональной деятельности в промышленности (в сфере организации и проведения научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ в области химического и химико-технологического производства).	ПК-3. Способен применять современные приборы и методы исследования, планировать, организовывать и проводить эксперименты и испытания, корректно обрабатывать и анализировать полученные результаты	ПК-3.3. Владеет приемами обработки, анализа и представления результатов эксперимента, навыками подготовки научно-технических отчетов	Профессиональный стандарт 40.011 «Специалист по научно-исследовательским и опытно-конструкторским разработкам», утвержденный приказом Министерства труда и социальной защиты Российской Федерации от 04.03.2014 № 121 н, Обобщенная трудовая функция С. Проведение научно-исследовательских и опытно-конструкторских разработок. С /01.6. Осуществление научного руководства проведением исследований по отдельным задачам (уровень квалификации – 6).
		ПК-5. Способен осуществлять самостоятельные научные исследования в области химии и технологии биологически активных веществ.	ПК-5.1. Знает методы получения, особенности производства, свойства и механизмы действия биологически активных веществ различных классов.	
			ПК-5.3. Умеет использовать теоретические знания по химии и технологии биологически активных веществ для решения конкретных задач научно-исследовательской деятельности	

В результате изучения дисциплины студент магистратуры должен:

Знать:

- основные принципы представления и обработки химической информации с помощью компьютерных систем;
- цели и принципы компьютерного моделирования связи структуры и активности лекарственных веществ, конструирования и оптимизации структур с заданной физиологической активностью;
- методы описания и моделирования структуры веществ;
- возможности и ограничения основных подходов к анализу связи структуры и биологической активности, пути анализа и интерпретации получаемых результатов.

Уметь:

- выбирать обоснованные подходы к анализу связи структуры и активности и конструированию структур с заданной физиологической активностью с учетом доступной информации об их действии в организме;
- оценивать надежность результатов компьютерного моделирования связи структура-биологическая активность и использовать их при поиске соединений с оптимальной активностью.

Владеть:

- теоретическими основами методов моделирования связи структуры веществ и их физиологической активности и навыками интерпретации его результатов;
- практическими навыками компьютерной обработки и анализа химической информации.

3. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Вид учебной работы	Объем дисциплины		
	ЗЕ	Акад. ч.	Астр. ч.
Общая трудоемкость дисциплины	3	108	81
Контактная работа – аудиторные занятия:	1,42	51	38,25
в том числе в форме практической подготовки	1,17	42	31,5
Лекции	0,25	9	6,75
Практические занятия	0,75	27	20,25
<i>в том числе в форме практической подготовки</i>	<i>0,75</i>	<i>27</i>	<i>20,25</i>
Лабораторные работы	0,42	15	11,25
<i>в том числе в форме практической подготовки</i>	<i>0,42</i>	<i>15</i>	<i>11,25</i>
Самостоятельная работа	1,58	57	42,75
Контактная самостоятельная работа	1,58	0,3	0,23
Самостоятельное изучение разделов дисциплины		56,4	42,52
Вид итогового контроля:	Зачет с оценкой		

4. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

4.1. Разделы дисциплины и виды занятий

№ п/п	Раздел дисциплины	Академ. часов								
		Всего	в т.ч. в форме пр. подг.	Лек- ции	в т.ч. в форме пр. подг.	Прак. зан.	в т.ч. в форме пр. подг.	Лаб. рабо- ты	в т.ч. в форме пр. подг.	Сам. рабо- та
1.	Раздел 1. Основные концепции хемоинформатики	14	2,5	1,5	-	2,5	2,5	-	-	10
2.	1.1 Хемоинформатика как междисциплинарная область современной науки	2.5	-	0.5	-	-	-	-	-	2
3.	1.2 Базовые принципы и концепции анализа связи структуры и биологической активности	5.5	1	0.5	-	1	1	-	-	4
4.	1.3 Классический QSAR	6	1,5	0.5	-	1,5	1,5	-	-	4
5	Раздел 2. Методы построения моделей связи структуры и активности Статистическое обучение	23	9,5	1,5	-	6,5	6,5	3	3	12
6	Раздел 3. Представление и описание структуры соединений	26	12	2	-	9	9	3	3	12
7	Раздел 4. Структура и взаимодействия лигандов и биомолекул	26	12	2	-	7	7	5	5	12
8	Раздел 5. Конструирование и поиск структур лекарств и биологически активных веществ Конструирование и поиск активных структур	19	6	2	-	2	2	4	4	11
9	ИТОГО	108	42	9	-	27	27	15	15	57

4.2. Содержание разделов дисциплины

Раздел 1. Основные концепции хемоинформатики.

1.1. Хемоинформатика как междисциплинарная область современной науки. Предмет, задачи и объекты хемоинформатики. Цикл разработки лекарственных средств, доклинические и клинические исследования. Выбор и валидация мишени, поиск и оптимизация соединений-лидеров. Компьютерное моделирование и дизайн физиологически активных соединений как одно из важнейших направлений хемоинформатики, химии биологически активных веществ и медицинской химии.

1.2. Базовые принципы и концепции анализа связи структуры и биологической активности. Биологические мишени и лиганды. Фармакодинамика и фармакокинетика. Биодоступность и токсичность. Принцип связи структуры и свойства/активности. Парадигма анализа количественной связи структура-активность (QSAR). Статистическое обучение. Модель, ее использование для прогнозирования и интерпретации. Построение модели и прогноз, обучающие, контрольные и прогнозные выборки. Математическое представление (описание) структур с помощью дескрипторов молекулярной структуры. Основные характеристики биологической активности, используемые в анализе связи «структура–активность». Различные уровни оценки биоактивности. Качественные и количественные характеристики. Концентрационные, термодинамические, кинетические, интегральные параметры. Зависимость эффекта от концентрации или дозы, логарифмическое представление активности.

1.3. Классический QSAR. Метод Хэнча. Использование простых физико-химических дескрипторов и статистических моделей. Липофильность и ее влияние на активность. Константы заместителей. Константы Гаммета и Тафта, липофильная константа Хэнча. Учет влияния нескольких заместителей. Метод Фри-Уилсона. Индикаторные переменные и вклады заместителей. Взаимосвязь подходов Хэнча и Фри-Уилсона, их преимущества и недостатки.

Раздел 2. Методы построения моделей связи структуры и активности.

2.1. Статистическое обучение. Принципы статистического анализа связи «структура-активность» и машинного обучения. Функциональные модели, зависимые и независимые переменные. Качество моделей: точность описания обучающей выборки и предсказательная способность. Внешний и внутренний контроль предсказательной способности моделей. Метод перекрестного контроля. Графический анализ соответствия экспериментальных и прогнозируемых значений. Зависимость точности описания и предсказательной способности от сложности моделей, выбор оптимальной модели. Множественная линейная регрессия, метод наименьших квадратов. Отбор дескрипторов. Проекция на скрытые переменные: анализ главных компонент, регрессия частичных наименьших квадратов. Методы классификации и распознавания образов. Виды классификационных задач. Кластерный анализ. Многоклассовая классификация: линейный дискриминантный анализ, деревья решений, метод мягкого независимого моделирования аналогии в классах (SIMCA). Понятие об одноклассовой классификации. Характеристики качества классификации. Моделирование нелинейных зависимостей. Искусственные нейронные сети как гибкий общий метод моделирования нелинейных зависимостей на основе упрощенных представлений об обработке информации в мозге человека и животных. Понятие о методе опорных векторов.

Раздел 3. Представление и описание структуры соединений.

3.1. Представление и описание структуры соединений. Молекулярные графы. Представление структуры соединений с помощью матриц, списков и текстовых строк. Типы дескрипторов молекулярной структуры. Инварианты молекулярных графов и топологические дескрипторы. Индексы Винера, Рандича, валентный индекс Рандича, индексы молекулярной связности Кира-Холла. Физико-химические дескрипторы, отражающие стерические и электронные характеристики молекул. Липофильность, ее роль в проявлении биологической активности и методы прогнозирования.

Подструктурные (фрагментные) дескрипторы и их применение для моделирования связи структуры органических соединений с их физико-химическими и фармакокинетическими свойствами, токсичностью, биоактивностью, оценки структурного подобия, прогнозирования спектров биоактивности веществ. Надструктурные методы в QSAR. Учет влияния локальных молекулярных характеристик и взаимного расположения фрагментов на биоактивность. Метод анализа топологии молекулярного поля (MFTA).

Раздел 4. Структура и взаимодействия лигандов и биомишеней.

4.1. Структура и взаимодействия лигандов и биомишеней. Значение пространственной структуры и взаимодействий биологической мишени и активного вещества на молекулярном уровне для понимания механизма действия и направленного конструирования лекарств. Индуцированное соответствие лиганда и мишени. Молекулярное моделирование. Молекулярная механика – моделирование структуры и взаимодействия молекул с помощью аппарата классической механики. Силовые поля и основные их компоненты. Конформационное пространство, оптимальная и биологически активная конформация. Молекулярная динамика – моделирование микроскопической картины теплового движения системы во времени. Анализ связи пространственной структуры молекул и биоактивности (3D QSAR). Метод сравнительного анализа молекулярных полей CoMFA. Фармакофорные модели. Двумерные и трехмерные фармакофоры. Фармакофорные центры, учет формы молекул. Структура и функционирование белковых биомишеней биологически активных веществ.

Моделирование пространственной структуры белков. Метод моделирования структуры белков по гомологии. Моделирование взаимодействия лиганда и биомишени. Молекулярный докинг – быстрая полуэмпирическая оценка возможности, места и способа связывания с учетом стерических требований и межмолекулярных взаимодействий. Жесткий, гибкий и полужесткий докинг. Оценочные функции. Более точный анализ связывания лигандов с помощью методов молекулярной механики и моделирования молекулярной динамики.

Раздел 5. Конструирование и поиск структур лекарств и биологически активных веществ.

5.1. Конструирование и поиск активных структур. Направленное конструирование активных структур на основе информации о мишени или известных лигандах: дизайн de novo, использование QSAR-моделей, обратная задача в QSAR. Виртуальный скрининг активных соединений. Этапы виртуального скрининга. Источники библиотек структур: интуиция исследователя, базы данных доступных соединений, базы данных возможных соединений, генерация структур. Предварительный отбор структур без учета информации о целевой активности. Исключение токсифорных и других нежелательных групп. Отбор соединений, похожих на лекарства, правила Липински. Подготовка библиотек структур. Многоуровневая специфическая фильтрация с использованием информации о структуре известных лигандов (прогнозирование активности с помощью моделей связи «структура–активность», оценка соответствия фармакофорным моделям) и структуре биомишени (молекулярный докинг, моделирование взаимодействия лиганда и мишени). Фокусированные библиотеки перспективных структур. Вероятностный характер виртуального скрининга. Ошибки классификации. Характеристики качества процедуры скрининга, подходы к ее оптимизации. Обогащение библиотеки и эффективность скрининга.

5. СООТВЕТСТВИЕ СОДЕРЖАНИЯ ТРЕБОВАНИЯМ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

№	В результате освоения дисциплины студент должен:	Раздел 1	Раздел 2	Раздел 3	Раздел 4	Раздел 5
	Знать:					
1	основные принципы представления и обработки химической информации с помощью компьютерных систем;	+	+	+	+	+
2	цели и принципы компьютерного моделирования связи структуры и активности лекарственных веществ, конструирования и оптимизации структур с заданной физиологической активностью;	+	+	+	+	+
3	методы описания и моделирования структуры веществ;	+	+	+	+	+
4	возможности и ограничения основных подходов к анализу связи структуры и биологической активности, пути анализа и интерпретации получаемых результатов;	+	+	+	+	+
	Уметь:					
5	выбирать обоснованные подходы к анализу связи структуры и активности и конструированию структур с заданной физиологической активностью с учетом доступной информации об их действии в организме;	+	+	+	+	+
6	оценивать надежность результатов компьютерного моделирования связи «структура – биологическая активность» и использовать их при поиске соединений с оптимальной активностью;	+	+	+	+	+
	Владеть:					
7	теоретическими основами методов моделирования связи структуры веществ и их физиологической активности и навыками интерпретации его результатов;	+	+	+	+	+
8	практическими навыками компьютерной обработки и анализа химической информации;	+	+	+	+	+

В результате освоения дисциплины студент должен приобрести следующие компетенции и индикаторы их достижения:							
	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК					
9	ПК-3. Способен применять современные приборы и методы исследования, планировать, организовывать и проводить эксперименты и испытания, корректно обрабатывать и анализировать полученные результаты.	ПК-3.3. Владеет приемами обработки, анализа и представления результатов эксперимента, навыками подготовки научно-технических отчетов.	+	+	+	+	+
10	ПК-5. Способен осуществлять самостоятельные научные исследования в области химии и технологии биологически активных веществ.	ПК-5.1. Знает методы получения, особенности производства, свойства и механизмы действия биологически активных веществ различных классов.	+	+	+	+	+
11		ПК-5.3. Умеет использовать теоретические знания по химии и технологии биологически активных веществ для решения конкретных задач научно-исследовательской деятельности.	+	+	+	+	+

6. ПРАКТИЧЕСКИЕ И ЛАБОРАТОРНЫЕ ЗАНЯТИЯ

6.1. Практические занятия

Примерные темы практических занятий по дисциплине.

№ п/п	№ раздела дисциплины	Темы практических занятий	Часы
1	1	Базовые принципы анализа связи структуры и биологической активности. Метод Хэнча. Константы заместителей.	2,5
2	2	Статистическое обучение	6,5
3	3	Дескрипторы молекулярной структуры	9
4	4	Структура и взаимодействия лигандов и биомолекул	7
5	5	Направленное конструирование и поиск структур лекарств	2
Итого:			27

6.2. Лабораторные занятия

Выполнение лабораторного практикума способствует закреплению материала, изучаемого в дисциплине «Хемоинформатика», а также дает знания о новейших разработках в области дизайна биологически активных веществ, выявления закономерностей связи структуры и биологической активности. Максимальное количество баллов за выполнение лабораторного практикума составляет 10 баллов (максимально по 2 балла за каждую работу). Количество работ и баллов за каждую работу может быть изменено в зависимости от их трудоемкости.

Примеры лабораторных работ и разделы, которые они охватывают

№ п/п	№ раздела дисциплины	Наименование лабораторных работ
1	Раздел 2, Раздел 3	Подготовка и обработка информации по структуре и биологической активности органических соединений.
2		Моделирование связи структуры и биологической активности потенциальных лекарственных веществ.
3	Раздел 4, Раздел 5	Виртуальный скрининг потенциальных лекарственных веществ методом фармакофорного поиска.
4		Моделирование пространственной молекулярной структуры органических соединений, анализ структуры биомолекулы и ее взаимодействия с активными лигандами
5		Виртуальный скрининг потенциальных лекарственных веществ методом молекулярного докинга.

7. САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА

Самостоятельная работа проводится с целью углубления знаний по дисциплине и предусматривает:

регулярную проработку пройденного на лекциях и практических занятиях учебного материала;

подготовку к контрольным работам по материалу дисциплины;

подготовку к лабораторным работам;

- работу с рекомендованной учебной и научной литературой, работу с электронно-библиотечными системами, включая переводы публикаций из научных журналов, цитируемых в базах Scopus, Web of Science, Chemical Abstracts, РИНЦ;
- участие в семинарах РХТУ им. И. Менделеева по тематике дисциплины;
- посещение отраслевых выставок, семинаров и конференций;
- подготовку к сдаче **зачета с оценкой** (1 семестр) по дисциплине.

Планирование времени на самостоятельную работу, необходимого на изучение дисциплины, студентам лучше всего осуществлять на весь период изучения, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала. Материал, законспектированный на лекциях, необходимо регулярно дополнять сведениями из литературных источников, представленных в рабочей программе. При работе с указанными источниками рекомендуется составлять краткий конспект материала, с обязательным фиксированием библиографических данных источника.

8. ПРИМЕРЫ ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ КОНТРОЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Совокупная оценка по дисциплине складывается из оценок за выполнение контрольных работ (максимальная оценка 40 баллов), расчетно-графической работы (максимальная оценка 10 баллов), лабораторного практикума (максимальная оценка 10 баллов) и итогового контроля в форме **зачета с оценкой** (максимальная оценка 40 баллов). Для текущего контроля предусмотрено 3 контрольные работы: контрольная работа № 1 (по разделам 1 и 2), контрольная работа № 2 (по разделу 3), контрольная работа № 3 (по разделам 4 и 5). Максимальная оценка за контрольные работы №1, №3 составляет 12 баллов, за контрольную работу №2 16 баллов. По материалам разделов 1,2,3,5 выполняется расчетно-графическая работа с максимальной оценкой в 10 баллов. Лабораторные работы в количестве 5 оцениваются в 10 баллов, по 2 балла каждая. Общее максимальное число баллов в семестре составляет 60 баллов.

8.1. Примерная тематика расчетно-графической работы.

Максимальная оценка – 10 баллов

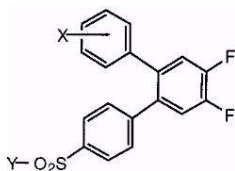
Вариант №1

В таблице приведены структуры, данные о биологической активности и значения некоторых молекулярных дескрипторов для ряда органических соединений.

1) С помощью какого-либо программного пакета статистического анализа (например, Microsoft Excel, Statistica, Origin, Maple, MathCAD, Mathlab, Statgraphics и т.д.) постройте для этих соединений линейные регрессионные модели связи структура-активность с использованием различных сочетаний из 1, 2 и 3 дескрипторов. Приведите таблицу статистических параметров моделей (коэффициенты, R , $RMSE$, F).

2) Учитывая значения параметров, выберите оптимальную модель, которая обеспечивает достаточно высокую точность при минимальном числе параметров. Запишите соответствующее регрессионное уравнение. Постройте для модели график соответствия экспериментальных и рассчитанных по модели значений активности.

3) Каков физико-химический смысл дескрипторов, входящих в оптимальную модель? Какое влияние на активность оказывают те или иные особенности структуры? Попытайтесь предложить структуру нового соединения, для которого можно ожидать повышения активности.



IC₅₀ – Ингибирование циклооксигеназы 2

N	X	Y	log 1/C	ClogP	σ_x^+	CMR
1	4-F	Me	7.85	4.67	-0.07	9.09
2	3-Cl-4-F	Me	8.00	5.38	0.30	9.59
3	3-Me-4-F	Me	8.30	5.17	-0.14	9.56
4	3-F-4-OMe	Me	7.68	4.52	-0.44	9.71
5	3-Cl-4-OMe	Me	7.72	5.06	-0.41	10.19
6	3-Me-4-OMe	Me	7.89	4.96	-0.85	10.16
7	3,4-(OMe) ₂	Me	6.47	4.17	-0.66	10.31
8	3-OCH ₂ O-4	Me	7.92	3.73	-0.68	9.67
9	4-Me	Me	8.16	5.03	-0.31	9.54
10	3-Cl-4-Me	Me	7.89	5.74	0.06	10.03
11	3,4-Me ₂	Me	7.64	5.47	-0.38	10.01
12	3-Me-4-Cl	Me	8.22	5.74	0.04	10.03

CLogP – расчетное значение LogP по методу Хэнча-Лео

σ^+ – константа Гаммета для заместителя при наличии резонанса

CMR – расчетное значение молекулярной рефракции

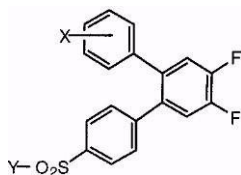
Вариант №2

В таблице приведены структуры, данные о биологической активности и значения некоторых молекулярных дескрипторов для ряда органических соединений.

1) С помощью какого-либо программного пакета статистического анализа (например, Microsoft Excel, Statistica, Origin, Maple, MathCAD, Mathlab, Statgraphics и т.д.) постройте для этих соединений линейные регрессионные модели связи структура-активность с использованием различных сочетаний из 1, 2 и 3 дескрипторов. Приведите таблицу статистических параметров моделей (коэффициенты, *R*, *RMSE*, *F*).

2) Учитывая значения параметров, выберите оптимальную модель, которая обеспечивает достаточно высокую точность при минимальном числе параметров. Запишите соответствующее регрессионное уравнение. Постройте для модели график соответствия экспериментальных и рассчитанных по модели значений активности.

3) Каков физико-химический смысл дескрипторов, входящих в оптимальную модель? Какое влияние на активность оказывают те или иные особенности структуры? Попытайтесь предложить структуру нового соединения, для которого можно ожидать повышения активности.

**IC₅₀ – Ингибирование циклооксигеназы 2**

N	X	Y	log 1/C	ClogP	σ_x^+	CMR
1	4-F	NH ₂	8.40	4.50	-0.07	9.00
2	3-Cl-4-F	NH ₂	8.70	5.22	0.30	9.49
3	3-Me-4-F	NH ₂	8.70	5.00	-0.14	9.46
4	3-F-4-OMe	NH ₂	7.89	4.37	-0.44	9.62
5	3-Cl-4-OMe	NH ₂	7.89	4.91	-0.41	10.09
6	3,5-Cl ₂ -4-OMe	NH ₂	7.68	5.43	-0.04	10.58
7	3-Me-4-OMe	NH ₂	8.30	4.79	-0.85	10.06
8	3,4-(OMe) ₂	NH ₂	7.19	4.02	-0.66	10.22
9	3-OCH ₂ O-4	NH ₂ ^o	8.40	3.58	-0.68	9.58

10	4-Me	NH ₂	8.40	4.86	-0.31	9.45
11	3-Cl-4-Me	NH ₂	8.52	5.57	0.06	9.94
12	3,4-Me ₂	NH ₂	8.30	5.31	-0.38	9.91

CLogP – расчетное значение LogP по методу Хэнча-Лео

σ^+ – константа Гаммета для заместителя при наличии резонанса

CMR – расчетное значение молекулярной рефракции

Оценочный материал к расчетно-графической работе

Вопрос	1	2	3	Σ
Баллы	2	3	5	10

8.2. Примеры контрольных вопросов для текущего контроля освоения дисциплины

Раздел 1. Основные концепции хемоинформатики.

1. Предмет, задачи и объекты хемоинформатики.
2. Роль компьютерного моделирования и дизайна физиологически активных соединений в современной химии биологически активных веществ и медицинской химии.
3. Парадигма анализа количественной связи структура-активность (QSAR).
4. Основные характеристики биологической активности, используемые в анализе связи «структура–активность».
5. Классический QSAR. Метод Хэнча. Константы заместителей.
6. Классический QSAR. Метод Фри-Уилсона.

Раздел 2. Методы построения моделей связи структуры и активности.

1. Принципы статистического анализа связи «структура-активность» и машинного обучения.
2. Качество моделей: точность описания обучающей выборки.
3. Качество моделей: предсказательная способность. Внешний и внутренний контроль предсказательной способности модел Графический анализ соответствия экспериментальных и прогнозируемых значений.
4. Зависимость точности описания и предсказательной способности от сложности моделей, выбор оптимальной модели.
5. Множественная линейная регрессия, метод наименьших квадратов.
6. Отбор дескрипторов в множественной линейной регрессии.
7. Проекция на скрытые переменные: анализ главных компонент.
8. Регрессия частичных наименьших квадратов.
9. Методы классификации и распознавания образов.
10. Моделирование нелинейных зависимостей. Искусственные нейронные сети как гибкий общий метод моделирования нелинейных зависимостей на основе упрощенных представлений об обработке информации в мозге человека и животных.

Раздел 3. Представление и описание структуры соединений.

1. Молекулярные графы. Представление структуры соединений с помощью матриц, списков и текстовых строк.
2. Типы дескрипторов молекулярной структуры.
3. Инварианты молекулярных графов и топологические дескрипторы. Индексы Винера, Рандича, валентный индекс Рандича, индексы молекулярной связности Кира-Холла.
4. Физико-химические дескрипторы, отражающие стерические и электронные характеристики молекул.
5. Липофильность, ее роль в проявлении биологической активности и методы прогнозирования.
6. Подструктурные (фрагментные) дескрипторы и их применение для моделирования связи структуры органических соединений с их физико-химическими и

фармакокинетическими свойствами, токсичностью, биоактивностью, оценки структурного подобия, прогнозирования спектров биоактивности веществ.

7. Надструктурные методы в QSAR. Учет влияния локальных молекулярных характеристик и взаимного расположения фрагментов на биоактивность. Метод анализа топологии молекулярного поля (MFTA).

Раздел 4. Структура и взаимодействия лигандов и биомишеней.

1. Значение пространственной структуры и взаимодействий биологической мишени и активного вещества на молекулярном уровне для понимания механизма действия и направленного конструирования лекарств. Индуцированное соответствие лиганда и мишени.

2. Молекулярная механика – моделирование структуры и взаимодействия молекул с помощью аппарата классической механики. Силовые поля и основные их компоненты.

3. Конформационное пространство, оптимальная и биологически активная конформация.

4. Молекулярная динамика – моделирование микроскопической картины теплового движения системы во времени.

5. Анализ связи пространственной структуры молекул и биоактивности (3D QSAR). Метод сравнительного анализа молекулярных полей CoMFA.

6. Фармакофорные модели. Двумерные и трехмерные фармакофоры. Фармакофорные центры, учет формы молекул.

7. Структура и функционирование белковых биомишеней биологически активных веществ. Моделирование пространственной структуры белков. Метод моделирования структуры белков по гомологии.

8. Моделирование взаимодействия лиганда и биомишени. Молекулярный докинг – быстрая полуэмпирическая оценка возможности, места и способа связывания с учетом стерических требований и межмолекулярных взаимодействий. Жесткий, гибкий и полужесткий докинг. Оценочные функции.

9. Анализ связывания лигандов с помощью методов молекулярной механики и моделирования молекулярной динамики

Раздел 5. Конструирование и поиск структур лекарств и биологически активных веществ.

1. Направленное конструирование активных структур на основе информации о мишени или известных лигандах: дизайн de novo, использование QSAR-моделей, обратная задача в QSAR.

2. Виртуальный скрининг активных соединений. Этапы виртуального скрининга.

3. Источники библиотек структур для виртуального скрининга: интуиция исследователя, базы данных доступных соединений, базы данных возможных соединений, генерация структур.

4. Виртуальный скрининг: предварительный отбор структур без учета информации о целевой активности. Исключение токсических и других нежелательных групп. Отбор соединений, похожих на лекарства, правила Липински. Подготовка библиотек структур.

5. Виртуальный скрининг: многоуровневая специфическая фильтрация с использованием информации о структуре известных лигандов (прогнозирование активности с помощью моделей связи «структура–активность», оценка соответствия фармакофорным моделям) и структуре биомишени (молекулярный докинг, моделирование взаимодействия лиганда и мишени).

6. Вероятностный характер виртуального скрининга. Ошибки классификации. Характеристики качества процедуры скрининга, подходы к ее оптимизации. Обогащение библиотеки и эффективность скрининга.

Примеры контрольных работ

Контрольная работа №1

Раздел 1. Основные концепции хемоинформатики

Раздел 2. Методы построения моделей связи структуры и активности.

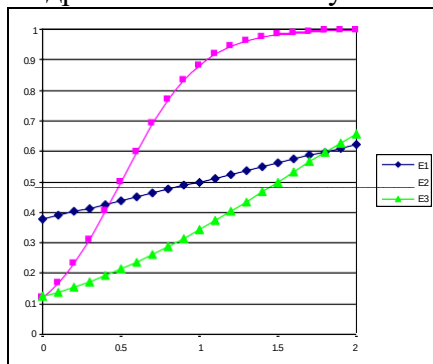
Максимальная оценка – 12 баллов

Оценочный материал к контрольной работе №1

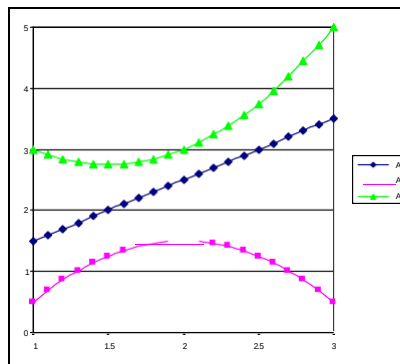
Вопрос	1	2	3	4	5	6	Σ
Баллы	3	3	2	1	2	1	12

Вариант №1

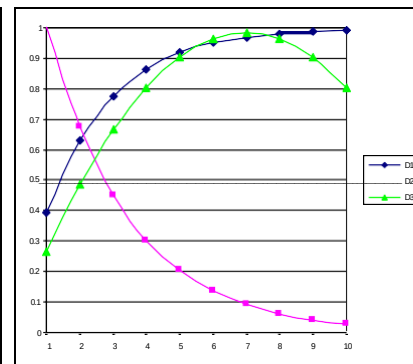
1. Роль компьютерного моделирования и дизайна физиологически активных соединений в современной химии биологически активных веществ и медицинской химии.
2. Качество моделей: точность описания обучающей выборки.
3. Используя приведенные на рисунке 1 зависимости концентрация-эффект, расставьте соединения по возрастанию активности. Ответ обоснуйте.
4. Какая кривая на рисунке 2 соответствует наиболее общему виду зависимости активности от липофильности? Ответ обоснуйте.
5. Что можно сказать о качестве модели, для которой среднеквадратическое отклонение имеет значение $RMSE = 0.85$? Ответ обоснуйте.
6. Какая кривая на рисунке 3 соответствует типичной зависимости параметра перекрестного контроля от числа факторов в модели регрессии частичных наименьших квадратов? Ответ обоснуйте.



1



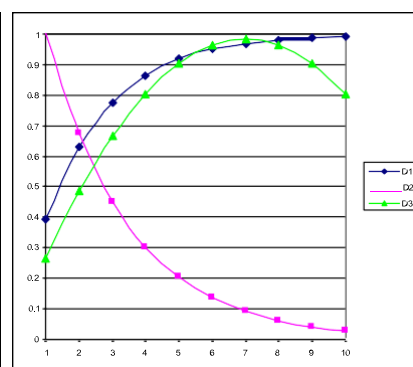
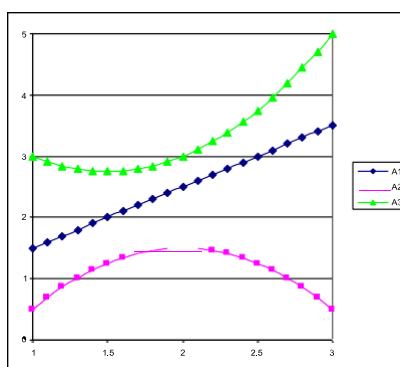
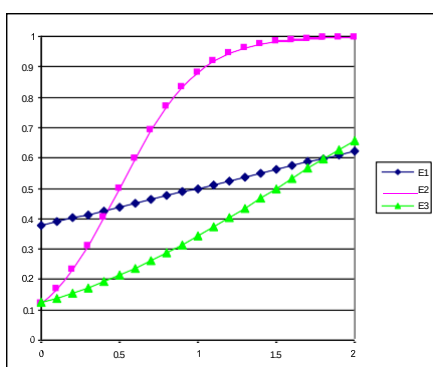
2



3

Вариант №2

1. Парадигма анализа количественной связи структура-активность (QSAR).
2. Регрессия частичных наименьших квадратов.
3. Используя приведенные на рисунке 1 зависимости концентрация-эффект, определите величину активности EC_{50} для соединения E3. Ответ обоснуйте.
4. Каково оптимальное для активности значение липофильности для кривой A2 на рисунке 2? Ответ обоснуйте.
5. Что можно сказать о качестве модели, для которой параметр перекрестного контроля имеет значение $Q^2 = 0.50$? Ответ обоснуйте.
6. Какая кривая на рисунке 3 соответствует типичной зависимости среднеквадратического отклонения от числа факторов в модели регрессии частичных наименьших квадратов? Ответ обоснуйте.



Контрольная работа №2**Раздел 3. Представление и описание структуры соединений**

Максимальная оценка – 16 баллов

Оценочный материал к контрольной работе №2

Вопрос	1	2	3	4	5	6	7	8	9	Σ
Баллы	3	1	1	2	1	1	3	3	1	16

Вариант №1

1. Липофильность, ее роль в проявлении биологической активности и методы прогнозирования.
2. Рассчитать индекс связности $^3\chi_c$ для 2,2-диметилгексана
3. Рассчитать индекс Винера W для диэтилкетона
4. Рассчитать индекс связности $^2\chi$ для 1,2-диметилциклопентана
5. Рассчитать индекс связности $^1\chi^V$ для γ -аминомасляной кислоты
6. Рассчитать индекс Рандича $^1\chi$ для анилина
7. Определить структуру по коду SMILES и рассчитать липофильность методом Реккера: NC(=O)Cc1ccc(Br)cc1
8. Определить виды и число фрагментов p1-p3 (учитываются типы атомов, число водородов и типы связей, например, Br-C=CH2): 1,1-дибром-2-этилциклопропан
9. Построить молекулярный суперграф для 1-гидроксинафталина, 1-метиламинонафталина и 1-хлор-7-метилнафталина

Вариант №2

1. Молекулярные графы. Представление структуры соединений с помощью матриц, списков и текстовых строк.
2. Рассчитать индекс связности $^4\chi_{rc}$ для 1,1,3-триметилциклопентана
3. Рассчитать индекс Винера W для неопентана
4. Рассчитать индекс связности $^2\chi$ для 1,1-диметилциклопропана
5. Рассчитать индекс связности $^1\chi^V$ для морфолина
6. Рассчитать индекс Рандича $^1\chi$ для 3,6-диметилоктана

7. Определить структуру по коду SMILES и рассчитать липофильность методом Реккера: CCOC(=O)C1CCCC(Br)C1
8. Определить виды и число фрагментов p1-p3 (учитываются типы атомов, число водородов и типы связей, например, Br-C=CH2): 1-аза-2,4-диметил-3-фторциклобутан
9. Построить молекулярный суперграф для 2-нитрохинолина, 2-бром-3-хлорхинолина и 8-гидроксихинолина

Контрольная работа №3

Раздел 4. Структура и взаимодействия лигандов и биомолекул

Раздел 5. Конструирование и поиск структур лекарств и биологически активных веществ

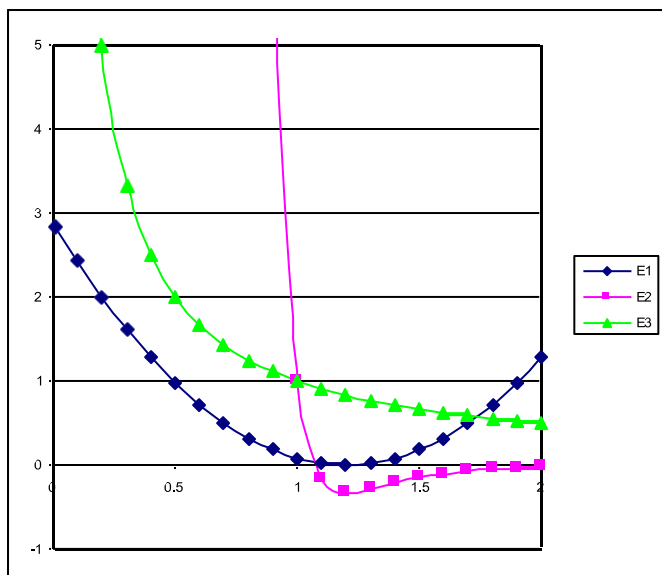
Максимальная оценка – 12 баллов

Оценочный материал к контрольной работе №3

Вопрос	1	2	3	4	5	Σ
Баллы	3	3	2	2	2	12

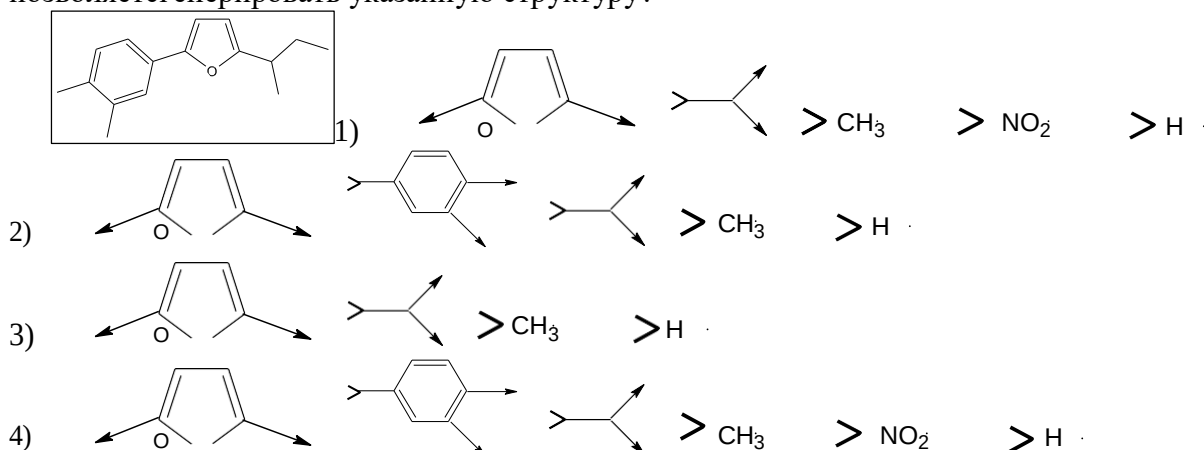
Вариант №1

1. Молекулярная механика – моделирование структуры и взаимодействия молекул с помощью аппарата классической механики. Силовые поля и основные их компоненты.
2. Виртуальный скрининг: предварительный отбор структур без учета информации о целевой активности. Исключение токсических и других нежелательных групп. Отбор соединений, похожих на лекарства, правила Липински. Подготовка библиотек структур.
3. Какая кривая на рисунке соответствует зависимости от расстояния для энергии деформации связей? Ответ обоснуйте.



4. Какие модификации необходимо произвести в структуре белка-шаблона в ходе моделирования структуры белка по гомологии для следующего фрагмента выравнивания: VVT LAW HVK GR LVP -- TYLS
VVT --- HVK VRL VPG AT FLS

5. Какой минимальный набор микрофрагментов (без ограничения их числа) позволяет генерировать указанную структуру?

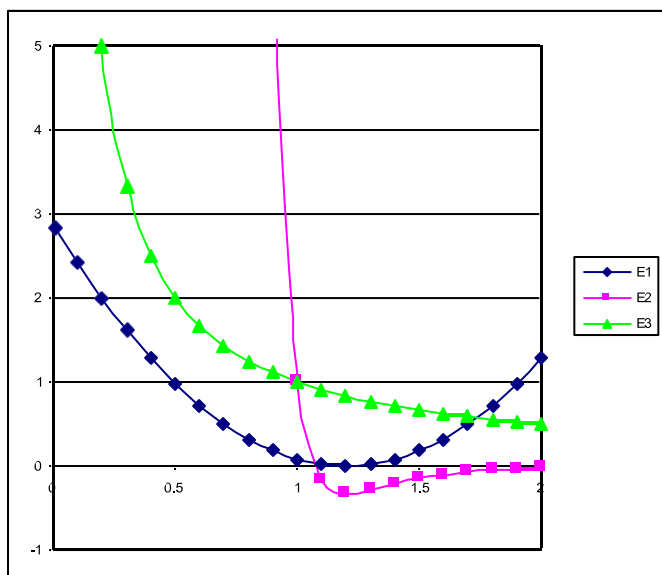


Вариант №2

1. Значение пространственной структуры и взаимодействий биологической мишени и активного вещества на молекулярном уровне для понимания механизма действия и направленного конструирования лекарств. Индуцированное соответствие лиганда и мишени.

2. Направленное конструирование активных структур на основе информации о мишени или известных лигандах: дизайн de novo, использование QSAR-моделей, обратная задача в QSAR.

3. Какая кривая на рисунке соответствует зависимости от расстояния для энергии электростатического взаимодействия одноименных зарядов? Ответ обоснуйте.

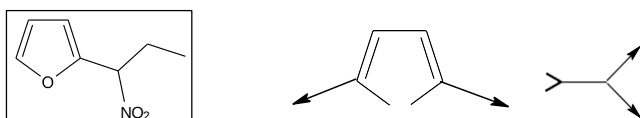


обоснуйте.

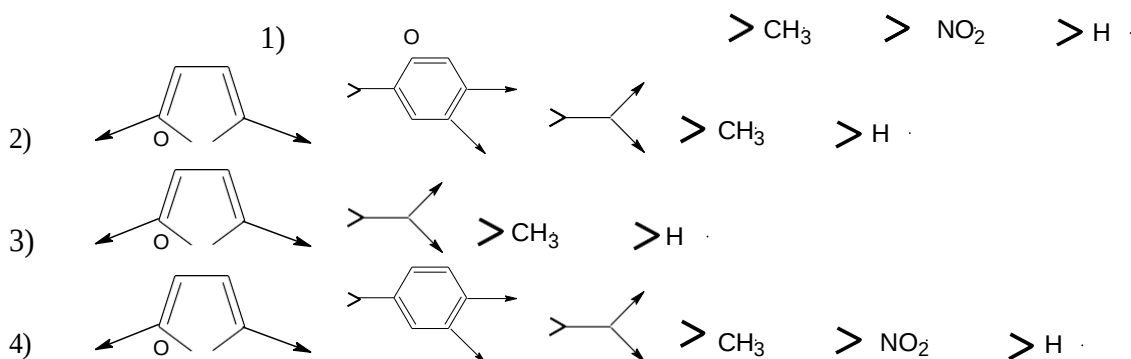
4. Какие модификации необходимо произвести в структуре белка-шаблона в ходе моделирования структуры белка по гомологии для следующего фрагмента выравнивания. VVT LAW HVK --- VPG AT YLS

VVT - AY HVK GRL VPG AS YLS

5. Какой минимальный набор микрофрагментов (без ограничения их числа)



позволяет сгенерировать указанную структуру?



5) Контрольные вопросы к лабораторным работам.

Лабораторная работа № 1 «Подготовка и обработка информации по структуре и биологической активности органических соединений»

- 1) Какие способы представления информации по структуре и биологической активности органических соединений применяются в хемоинформатике?
- 2) Какие основные проблемы могут встречаться в базах данных по структуре и биологической активности органических соединений, полученных из литературных источников?
- 3) Какие варианты поиска можно проводить в базе данных по структуре и биологической активности органических соединений?
- 4) Как осуществляется модификация и дополнение информации в базе данных по структуре и биологической активности органических соединений?
- 5) Что представляют собой рассчитываемые поля и для чего их можно использовать?

Лабораторная работа № 2 «Моделирование связи структуры и биологической активности потенциальных лекарственных веществ»

- 1) Какие основные типы дескрипторов применяются для моделирования связи структуры и биологической активности потенциальных лекарственных веществ?
- 2) Какие основные статистические модели используются для нахождения связи структуры и биологической активности соединений?
- 3) Какое представление биологической активности целесообразно использовать при построении моделей связи структуры и биологической активности и почему?
- 4) Как осуществляется контроль предсказательной способности моделей связи структуры и биологической активности?
- 5) Возможно ли использование такого подхода для прогнозирования физико-химических свойств соединений?

Лабораторная работа № 3 «Виртуальный скрининг потенциальных лекарственных веществ методом фармакофорного поиска»

- 1) Что такое фармакофорная модель? Какие особенности структуры она описывает?
- 2) На основе какой информации строится фармакофорная модель?
- 3) Каким образом выполняется анализ и уточнение фармакофорной модели?
- 4) Как фармакофорная модель применяется для виртуального скрининга?
- 5) Каким образом оценивается качество фармакофорной модели?

Лабораторная работа № 4 «Моделирование пространственной молекулярной структуры органических соединений, анализ структуры биомолекулы и ее взаимодействия с

активными лигандами»

- 1) Как осуществляется оптимизация структуры молекул методом молекулярной механики?
- 2) Какие типы молекулярных поверхностей можно рассматривать при анализе структуры молекул?
- 3) Из каких источников можно получить информацию о структуре биологических мишеней?
- 4) Что представляет собой сайт связывания в структуре биологической мишени?
- 5) Какие специфические взаимодействия могут возникать между лигандом и биомишенью?

Лабораторная работа № 5 «Виртуальный скрининг потенциальных лекарственных веществ методом молекулярного докинга»

- 1) Какие данные необходимы для оценки взаимодействия лиганда и биомишени методом молекулярного докинга?
- 2) Как осуществляется подготовка структуры биомишени для докинга?
- 3) Что такое оценочная функция и как она характеризует взаимодействие лиганда и биомишени?
- 4) Как метод молекулярного докинга применяется для анализа взаимодействий лиганда в сайте связывания и виртуального скрининга?
- 5) Каким образом оценивается и оптимизируется точность процедуры виртуального скрининга с помощью молекулярного докинга?

8.3. Вопросы для итогового контроля освоения дисциплины

(I семестр – зачет с оценкой).

Максимальное количество баллов за зачет с оценкой – 40 баллов.
Контрольный билет содержит 2 вопроса.

1 вопрос – 20 баллов, вопрос 2 – 20 баллов.

8.3.1. Примеры контрольных вопросов для итогового контроля освоения дисциплины (I семестр – зачет с оценкой).

Максимальное количество баллов за зачет с оценкой – 40 баллов.

1. Предмет, задачи и объекты хемоинформатики. Роль компьютерного моделирования и дизайна физиологически активных соединений в современной химии биологически активных веществ и медицинской химии.
2. Парадигма анализа количественной связи структура-активность (QSAR). Основные характеристики биологической активности, используемые в анализе связи «структура–активность».

8.4. Структура и примеры билетов для зачета с оценкой (I семестр).

Зачет с оценкой по дисциплине «Хемоинформатика» проводится в I семестре и включает контрольные вопросы по всем разделам учебной программы дисциплины. Билет для **зачета с оценкой** состоит из 2 вопросов, относящихся к указанным разделам. Ответы на вопросы **зачета с оценкой** оцениваются из максимальной оценки 40 баллов по 20 баллов за каждый вопрос.

Пример билета для *зачета с оценкой*:

«Утверждаю»	Министерство образования и науки РФ
зав. кафедрой ХТОС	Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева
_____ С.В. Попков	Кафедра химии и технологии органического синтеза
«__»_____20__г.	18.04.01 – «Химическая технология» Магистерская программа – «Химия и технология биологически активных веществ»
	«Хемоинформатика»
Билет зачета с оценкой № 1 1. Классический QSAR. Метод Хэнча. Константы заместителей. Метод Фри-Уилсона. 2. Молекулярная механика – моделирование структуры и взаимодействия молекул с помощью аппарата классической механики. Силовые поля и основные их компоненты.	

9. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

9.1. Рекомендуемая литература

А. Основная литература

1. Хёльте Х.-Д., Зиппл В., Роньян Д., Фолькерс Г. Молекулярное моделирование. Теория и практика. М.: Бином, 2010.— 318 с.

Б. Дополнительная литература

1. Орлов С.И. Математические методы оценки связи структура – пестицидная активность. Учебное пособие. / М.: РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2001. 64 с.
2. Раевский, О. А. Введение в конструирование биологически активных веществ [Текст] : учебное пособие / О.А. Раевский. - М. : МХТИ, 1984. - 80 с
3. Раевский, О. А. Сборник задач по курсу "Конструирование биологически активных веществ" [Текст] : учебное пособие / О.А. Раевский, В.Ю. Григорьев. - М. : МХТИ, 1986. - 80 с.
4. Кларк, Т. Компьютерная химия: Практическое руководство по расчетам структуры и энергии молекулы [Текст] : пер. с англ. / Т. Кларк. - М. : Мир, 1990. - 384 с.

9.2. Рекомендуемые источники научно-технической информации

- учебные пособия по дисциплине;
- раздаточный материал к разделам лекционного курса и к практическим занятиям по дисциплине;
- электронные презентации к разделам лекционного курса;
- справочные материалы в печатном и электронном виде;
- кафедральные библиотеки электронных изданий.

Научно-технические журналы:

- Журнал «Химико-фармацевтический журнал» ISSN 0023-1134.

- Журнал « Journal of medicinal chemistry» ISSN 0022-2623.
- Журнал «QSAR and combinatorial science» ISSN 1611-020X, 1521-3838 (онлайновая версия).

Ресурсы информационно–телекоммуникационной сети Интернет:

- <http://lib.muctr.ru/> - фонды учебной, учебно-методической, научной, периодической научно-технической литературы Информационно-библиотечного центра (ИБЦ) РХТУ им. Д. И. Менделеева;
- <http://www.muctr.ru/univsubs/infacol/hft/faculties/f4> - сайт кафедры химии и технологии органического синтеза

9.3. Средства обеспечения освоения дисциплины

Для реализации учебной программы подготовлены следующие средства обеспечения освоения дисциплины:

- компьютерные презентации интерактивных лекций – по 5 разделам дисциплины,(общее число слайдов – 486);

Для реализации учебной программы с использованием электронного обучения (ЭО) и дистанционных образовательных технологий (ДОТ) применяются следующие образовательные технологии и средства обеспечения дисциплины:

- ЕИОС РХТУ им. Д.И. Менделеева;
- платформы для проведения онлайн конференций (Zoom, Skype и др.);
- сервисы по доставки e-mail сообщений.

Для проведения промежуточных и итоговой аттестации могут использоваться такие сервисы как: Яндекс.Формы, Zoom, Skype, отдельные специализированные модули LMS.

10. ПЕРЕЧЕНЬ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ В ОБРАЗОВАТЕЛЬНОМ ПРОЦЕССЕ

Информационную поддержку изучения дисциплины осуществляет Информационно-библиотечный центр (ИБЦ) РХТУ им. Д.И. Менделеева, который обеспечивает обучающихся основной учебной, учебно-методической и научной литературой, необходимой для организации образовательного процесса по дисциплине. Общий объем многоотраслевого фонда ИБЦ на 01.01.2024 составляет 1 559 436 экз.

Фонд ИБЦ располагает учебной, учебно-методической и научно-технической литературой в форме печатных и электронных изданий, а также включает официальные, справочно-библиографические, специализированные отечественные и зарубежные периодические и информационные издания. ИБЦ обеспечивает доступ к профессиональным базам данных, информационным, справочным и поисковым системам.

Каждый обучающийся обеспечен свободным доступом из любой точки, в которой имеется доступ к сети Интернет и к электронно-библиотечной системе (ЭБС) Университета, которая содержит различные издания по основным изучаемым дисциплинам и сформирована по согласованию с правообладателями учебной и учебно-методической литературы.

Для более полного и оперативного справочно-библиографического и информационного обслуживания в ИБЦ реализована технология Электронной доставки документов.

Полный перечень электронных информационных ресурсов, используемых в процессе обучения, представлен в основной образовательной программе.

11. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

В соответствии с учебным планом занятия по дисциплине «Хемоинформатика» проводятся в форме лекций, практических, лабораторных занятий и самостоятельной работы обучающегося.

11.1. Оборудование, необходимое в образовательном процессе:

Лекционная учебная аудитория, оборудованная электронными средствами демонстрации (компьютер со средствами звуковоспроизведения, проектор, экран) и учебной мебелью.

Библиотека, имеющая рабочие места, оснащенные компьютерами с доступом к базам данных и выходом в Интернет.

Для проведения лабораторных занятий:

Компьютеры с выходом в Интернет;

Специализированные компьютерные программы для обработки структурной информации и молекулярного моделирования (ChemAxon Instant JChem, UCSF Chimera, AutoDock Vina, OpenEye ROCS).

ChemAxon Instant JChem (бесплатная академическая лицензия на сайте <https://chemaxon.com>)

UCSF Chimera (бесплатно распространяется для академического и некоммерческого использования <http://www.cgl.ucsf.edu/chimera>)

AutoDock Vina (бесплатное открытое программное обеспечение <http://vina.scripps.edu>)

OpenEye ROCS (бесплатная академическая лицензия на сайте <https://www.eyesopen.com>). В соответствии с учебным планом занятия по дисциплине «Хемоинформатика» проводятся в форме лекций, практических, лабораторных занятий и самостоятельной работы обучающегося.

11.2. Учебно-наглядные пособия:

Электронные презентации к разделам лекционного курса. Справочные материалы в печатном и электронном виде. Кафедральные библиотеки электронных изданий.

11.3. Компьютеры, информационно-телекоммуникационные сети, аппаратно-программные и аудиовизуальные средства:

Персональные компьютеры, укомплектованные проигрывателями CD и DVD, принтерами и программными средствами.

Проекторы и экраны.

Копировальные аппараты.

Локальная сеть с выходом в Интернет.

Мультимедийный проектор в комплекте с ноутбуком, Оверхед проектор Medium 524 Р 3-х линзовый.

11.4. Печатные и электронные образовательные и информационные ресурсы:

Информационно-методические материалы: учебные пособия по дисциплине.

Электронные образовательные ресурсы: учебно-методические разработки в электронном виде; справочные материалы в печатном и электронном виде; кафедральная библиотека электронных изданий.

11.5. Перечень лицензионного программного обеспечения:

Полный перечень лицензионного программного обеспечения представлен в основной образовательной программе.

№ п.п.	Наименование программного продукта	Реквизиты договора поставки	Срок окончания действия лицензии
1.	WINDOWS 8.1 Professional Get Genuine	Контракт № 62-64ЭА/2013 от 02.12.2013	бессрочно
2.	Micosoft Office Standard 2013	Контракт № 62-64ЭА/2013 от 02.12.2013	бессрочная
3.	WINHOME 10 Russian OLV NL Each AcademicEdition	Контракт № 28-35ЭА/2020 от 26.05.2020	бессрочно
4.	Microsoft Office Standard 2019 В составе: • Word • Excel • Power Point • Outlook	Контракт №175- 262ЭА/2019 от 30.12.2019	12 месяцев (ежегодное продление подписки с правом перехода на обновлённую версию продукта)
5.	Kaspersky Endpoint Security для бизнеса – Стандартный Russian Edition.	Договор № 99-155ЭА-223/2024	12 месяцев (ежегодное продление подписки с правом перехода на обновлённую версию продукта)

11. ТРЕБОВАНИЯ К ОЦЕНКЕ КАЧЕСТВА ОСВОЕНИЯ ПРОГРАММЫ

Наименование модулей	Основные показатели оценки	Формы и методы контроля и оценки
Раздел 1. Основные концепции хемоинформатики	<i>Знает:</i> – основные принципы представления и обработки химической информации с помощью компьютерных систем; – цели и принципы компьютерного моделирования связи структуры и активности лекарственных веществ, конструирования и оптимизации структур с заданной физиологической активностью; – методы описания и моделирования структуры веществ; – возможности и ограничения основных подходов к анализу связи структуры и биологической активности, пути анализа и интерпретации получаемых результатов. <i>Умеет:</i> – выбирать обоснованные подходы к анализу связи структуры и активности и конструированию структур с заданной физиологической активностью с учетом доступной информации об их действии в организме; – оценивать надежность результатов компьютерного моделирования связи структура-биологическая активность и использовать их при поиске соединений с оптимальной активностью. <i>Владеет:</i> – теоретическими основами методов моделирования связи структуры веществ и их физиологической активности и навыками интерпретации его результатов; – практическими навыками компьютерной обработки и анализа химической информации.	Оценка за контрольную работу №1, (2 семестр) Оценка за расчетно-графическую работу №4 (2 семестр) Оценка за зачет с оценкой (2 семестр)
Раздел 2. Методы построения моделей связи структуры и активности.	<i>Знает:</i> – основные принципы представления и обработки химической информации с помощью компьютерных систем; – цели и принципы компьютерного моделирования связи структуры и активности лекарственных веществ, конструирования и оптимизации структур с заданной физиологической активностью;	Оценка за контрольную работу №1 (2 семестр) Оценка за расчетно-графическую работу №4 (2 семестр)

	- методы описания и моделирования структуры веществ;	Оценка за лабораторные работы №1–2 (2 семестр) Оценка за зачет с оценкой (2 семестр)
	– возможности и ограничения основных подходов к анализу связи структуры и биологической активности, пути анализа и интерпретации получаемых результатов. <i>Умеет:</i> –выбирать обоснованные подходы к анализу связи структуры и активности и конструированию структур с заданной физиологической активностью с учетом доступной информации об их действии в организме; –оценивать надежность результатов компьютерного моделирования связи структура-биологическая активность и использовать их при поиске соединений с оптимальной активностью <i>Владеет:</i> – теоретическими основами методов моделирования связи структуры веществ и их физиологической активности и навыками интерпретации его результатов; – практическими навыками компьютерной обработки и анализа химической информации.	

Раздел 3. Представление и описание структуры соединений.	<i>Знаёт:</i> – основные принципы представления и обработки химической информации с помощью компьютерных систем; – цели и принципы компьютерного моделирования связи структуры и активности лекарственных веществ, конструирования и оптимизации структур с заданной физиологической активностью; – методы описания и моделирования структуры веществ; – возможности и ограничения основных подходов к анализу связи структуры и биологической активности, пути анализа и интерпретации получаемых результатов. <i>Умеет:</i> – выбирать обоснованные подходы к анализу связи структуры и активности и конструированию структур с заданной физиологической активностью с учетом доступной информации об их действии в организме; – оценивать надежность результатов компьютерного моделирования связи структура-биологическая активность и использовать их при поиске соединений с оптимальной активностью	Оценка за контрольную работу №2 (2 семестр) Оценка за расчетно-графическую работу №4 (2 семестр) Оценка за лабораторные работы №1–2 (2 семестр) Оценка за зачет с оценкой (2 семестр)

	<i>Владеет:</i> – теоретическими основами методов моделирования связи структуры веществ и их физиологической активности и навыками интерпретации его результатов; – ☐ практическими навыками компьютерной обработки и анализа химической информации. ☐	
Раздел 4. Структура и взаимодействия лигандов и биомолекул.	<i>Знает:</i> – основные принципы представления и обработки химической информации с помощью компьютерных систем; – цели и принципы компьютерного моделирования связи структуры и активности лекарственных веществ, конструирования и оптимизации структур с заданной физиологической активностью; – методы описания и моделирования структуры веществ; – возможности и ограничения основных подходов к анализу связи структуры и биологической активности, пути анализа и интерпретации получаемых результатов. <i>Умеет:</i> – выбирать обоснованные подходы к анализу связи структуры и активности и конструированию структур с заданной физиологической активностью с учетом доступной информации об их действии в организме; – оценивать надежность результатов компьютерного моделирования связи структура-биологическая активность и использовать их при поиске соединений с оптимальной активностью <i>Владеет:</i> – теоретическими основами методов моделирования связи структуры веществ и их физиологической активности и навыками интерпретации его результатов; – практическими навыками компьютерной обработки и анализа	Оценка за контрольную работу №3 (2 семестр) Оценка за лабораторные работы №3–5 (2 семестр) Оценка за зачет с оценкой (2 семестр)

	химической информации.	
Раздел 5.	<i>Знает:</i> – основные принципы представления и обработки химической информации с помощью компьютерных систем; – цели и принципы компьютерного моделирования связи структуры и активности лекарственных веществ, конструирования и оптимизации структур с заданной физиологической активностью; – методы описания и моделирования структуры веществ; – возможности и ограничения основных подходов к анализу связи структуры и биологической активности, пути анализа и интерпретации получаемых результатов.	Оценка за контрольную
Конструирование и	<i>Умеет:</i> – выбирать обоснованные подходы к анализу связи структуры и активности и конструированию структур с заданной физиологической активностью с учетом доступной информации об их действии в организме; – оценивать надежность результатов компьютерного моделирования связи структура-биологическая активность и использовать их при поиске соединений с оптимальной активностью	работу №3 (2 семестр)
поиск структур лекарств и биологически	<i>Владеет:</i> – теоретическими основами методов моделирования связи структуры веществ и их физиологической активности и навыками интерпретации его результатов; – практическими навыками компьютерной обработки и анализа	Оценка за расчетно-графическую работу
активных веществ.		№4 (2 семестр) Оценка за лабораторные работы №3–5 (2 семестр) Оценка за зачет с оценкой (2 семестр)

12. ОСОБЕННОСТИ ОРГАНИЗАЦИИ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО ПРОЦЕССА ДЛЯ ИНВАЛИДОВ И ЛИЦ С ОГРАНИЧЕННЫМИ ВОЗМОЖНОСТЯМИ ЗДОРОВЬЯ

Обучение инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья осуществляется в соответствии с:

- Порядком организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры (Приказ Министерства науки и высшего образования Российской Федерации от 06.04.2021 № 245);

- Положением о порядке организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева», принятым решением Ученого совета РХТУ им. Д.И. Менделеева от 28.12.2022, протокол № 5;

- Методическими рекомендациями по организации образовательного процесса для обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья в образовательных организациях высшего образования, в том числе оснащённости образовательного процесса (утверждены заместителем Министра образования и науки РФ А.А. Климовым от 08.04.2014 № АК-44/05вн).

—

Дополнения и изменения к рабочей программе дисциплины
«Хемоинформатика»
основной образовательной программы

Направление подготовки _____ 18.04.01 – Химическая технология
Магистерская программа «Химия и технология биологически активных веществ»

—

Номер изменения/ дополнения	Содержание дополнения/изменения	Основание внесения изменения/дополнения
1.		протокол заседания Ученого совета № _____ от « ____ » _____ 20 ____ г.
		протокол заседания Ученого совета № _____ от « ____ » _____ 20 ____ г.
		протокол заседания Ученого совета № _____ от « ____ » _____ 20 ____ г.
		протокол заседания Ученого совета № _____ от « ____ » _____ 20 ____ г.
		протокол заседания Ученого совета № _____ от « ____ » _____ 20 ____ г.

—

**Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Российский химико-технологический университет
имени Д.И. Менделеева»**

«УТВЕРЖДЕНО»

на заседании Ученого совета

РХТУ им. Д.И. Менделеева

протокол № 1 от «29» августа 2024 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

«Химия и технология агрохимических препаратов»

Направление подготовки 18.04.01 Химическая технология
(Код и наименование направления подготовки)

**Магистерская программа – «Химия и технология биологически активных
веществ»**
(Наименование магистерской программы)

Квалификация «магистр»

Москва 2024

Программа составлена: к.х.н., доцентом, заведующим кафедрой химии и технологии органического синтеза С.В. Попковым; к.х.н., доцентом, доцентом кафедры химии и технологии органического синтеза В.В. Захарычевым

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры химии и технологии органического синтеза

«26» апреля 2024 г., протокол №7

1. ЦЕЛЬ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ

Программа составлена в соответствии с требованиями Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования – магистратура по направлению подготовки **18.04.01 Химическая технология** (ФГОС ВО), рекомендациями Методической комиссии и накопленным опытом преподавания дисциплины кафедрой **Химии и технологии органического синтеза** РХТУ им. Д.И. Менделеева. Программа рассчитана на изучение дисциплины в течение одного семестра.

Дисциплина **«Химия и технология агрохимических препаратов»** относится к дисциплинам по выбору части дисциплин учебного плана, формируемой участниками образовательных отношений и рассчитана на изучение в одном семестре. Программа дисциплины предполагает, что обучающиеся имеют теоретическую и практическую подготовку в области изучения дисциплин: «Общая и неорганическая химия», «Органическая химия», а также «Основы биохимии», «Химия и технология биологически активных веществ», «Основы проектирования производств биологически активных веществ».

Цель дисциплины – формирование у обучающихся систематизированных знаний о методах синтеза, технологиях получения, механизмах действия и применении агрохимических препаратов, повышение профессиональных компетенций в области получения и использования современных биологически активных веществ сельскохозяйственного и ветеринарного назначения.

Задачи дисциплины –

- изучить принципы и методы разработки биологически активных веществ: основных классов гербицидов, регуляторов роста, инсектицидов и фунгицидов;
- освоить методы синтеза, механизмы действия и особенности применения химических средств защиты растений;
- сформировать навыки разработки рациональных методов получения действующих веществ агрохимических препаратов.

Дисциплина **«Химия и технология агрохимических препаратов»** преподается во 2 семестре. Контроль успеваемости студентов ведется по принятой в университете рейтинговой системе.

Рабочая программа дисциплины может быть реализована с применением электронных образовательных технологий и электронного обучения полностью или частично.

2. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Изучение дисциплины направлено на приобретение следующих **компетенций и индикаторов их достижения**:

Профессиональные компетенции и индикаторы их достижения:

Задача профессиональной деятельности	Объект или область знания	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК	Основание (профессиональный стандарт, анализ опыта) Обобщенные трудовые функции
Научно-исследовательский тип задач профессиональной деятельности				
Выполнение фундаментальных и прикладных работ поискового, теоретического и экспериментального характера с целью определения технических характеристик новой техники, а также комплекса работ по разработке технологической документации.	Химическое, химико-технологическое производство Сквозные виды профессиональной деятельности в промышленности (в сфере организации и проведения научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ в области химического и химико-технологического производства).	ПК-2. Способен к поиску, обработке, анализу и систематизации научно-технической информации по теме исследования, выбору методик и средств решения задачи	ПК-2.1. Знает алгоритм поиска, оценки и анализа научно-технической информации.	Профессиональный стандарт 40.011 «Специалист по научно-исследовательским и опытно-конструкторским разработкам», утвержденный приказом Министерства труда и социальной защиты Российской Федерации от 04.03.2014 № 121 н, Обобщенная трудовая функция С. Проведение научно-исследовательских и опытно-конструкторских разработок. С /01.6. Осуществление научного руководства проведением исследований по отдельным задачам (уровень квалификации – 6).
			ПК-2.2. Умеет обобщать и систематизировать научно-техническую информацию.	
			ПК-2.3. Владеет навыками соотнесения результатов собственной научной работы с отечественным и зарубежным опытом по тематике исследования.	

Задача профессиональной деятельности	Объект или область знания	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК	Основание (профессиональный стандарт, анализ опыта) Обобщенные трудовые функции
		ПК-4. Способен проводить поисковые исследования инновационных технологических процессов в области биологически активных веществ.	ПК-4.2. Умеет производить поисковые работы для разработки новых методов получения и анализа биологически активных веществ.	
		ПК-5. Способен осуществлять самостоятельные научные исследования в области химии и технологии биологически активных веществ.	ПК-5.1. Знает методы получения, особенности производства, свойства и механизмы действия биологически активных веществ различных классов.	

В результате изучения дисциплины студент магистратуры должен:

Знать:

- современные тенденции разработки и применения агрохимических препаратов;
- области применения, классификацию агрохимических препаратов;
- принципы и методы разработки биологически активных веществ с заданными свойствами;
- основные классы и их широко применяемых представителей гербицидов, регуляторов роста, инсектицидов, фунгицидов.

Уметь:

- анализировать различные методы синтеза агрохимических препаратов, выбрать наиболее технологически применимую схему получения действующего вещества;
- обосновать применение различных классов агрохимических препаратов в зависимости от особенностей применения, вида вредоносных организмов, возникновения резистентности;
- по химической структуре соединения выявить фармакофорные фрагменты и обосновать механизм действия агрохимических препаратов.

Владеть:

- методами синтеза широко применяемых представителей гербицидов, регуляторов роста, инсектицидов, фунгицидов;
- принципами разработки современных технологий агрохимических препаратов.

3. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Вид учебной работы	Объем дисциплины		
	ЗЕ	Акад. ч.	Астр.ч.
Общая трудоемкость дисциплины	4	144	108
в том числе в форме практической подготовки	0,94	34	25,5
Контактная работа – аудиторные занятия:	1,41	51	38,25
Лекции	0,47	17	12,75
Практические занятия	0,94	34	25,5
<i>в том числе в форме практической подготовки</i>	<i>0,94</i>	<i>34</i>	<i>25,5</i>
Самостоятельная работа	1,59	57	42,75
Самостоятельное изучение разделов дисциплины	1,59	57	42,75
Вид контроля:			
Экзамен	1	36	27
Контактная работа – промежуточная аттестация	1	0,3	0,23
Подготовка к экзамену.		35,7	26,77
Вид итогового контроля:	Экзамен		

4. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

4.1. Разделы дисциплины и виды занятий

№ п/п	Раздел дисциплины	Академ. часов								
		Всего	в т.ч. в форм е пр. подг.	Лек- ции	в т.ч. в форме пр. подг.	Прак. зан.	в т.ч. в форм е пр. подг.	Лаб. работ ы	в т.ч. в форм е пр. подг.	Сам. рабо- та
	Введение. Основные понятия. Классификация.	3	1	1	-	1	1	-	-	1
1	Раздел 1. Фитоактивные соединения.	33	11	4	-	11	11	-	-	18
1.1	Гербицидные препараты. Фитогормоны, их аналоги и антагонисты.	33	11	4	-	11	11	-	-	18
2	Раздел 2. Инсектоакарициды.	36	11	6	-	11	11	-	-	19
2.1	Инсектоакарицидные препараты.	25	8	4	-	8	8	-	-	13
2.2	Регуляторы роста и развития насекомых, а также их аналоги.	11	3	2	-	3	3	-	-	6
3	Раздел 3 Фунгициды и антимикотики.	36	11	6	-	11	11	-	-	19
3.1	Контактные фунгициды.	10	3	2	-	3	3	-	-	5
3.2	Системные фунгициды и антимикотики	26	8	4	-	8	8	-	-	14
	ИТОГО:	108	34	9	-	34	34	-	-	57
	Экзамен	36	-	-	-	-	-	-	-	-
	ИТОГО	144	-	-	-	-	-	-	-	-

4.2. Содержание разделов дисциплины

Введение.

Основные современные тенденции в создании и применении агрохимических препаратов. Классификация агрохимических препаратов. Основные методы и подходы при разработке новых агрохимических препаратов. Связь структура – активность, молекулярное моделирование.

Раздел 1. Фитоактивные соединения.

1.1. Способы борьбы с сорными растениями, преимущества и недостатки химического метода. Классификация гербицидов. Избирательность действия гербицидов. Охрана окружающей среды. Фитогормоны и их аналоги. Арилоксиуксусные кислоты и другие синтетические ауксины. Технология получения. Роль хлорированных дибензодиоксинов как экотоксикантов. Гиббереллины и ретарданты. Природные и синтетические цитокинины. Этилен его аналоги и антагонисты, этиленпродуценты. Абсцизовая кислота. Гербицидные препараты, нарушающие фотосинтез. Вещества, блокирующие транспорт электронов в фотосистеме II, акцепторы электронов в фотосистеме I. Вещества, нарушающие биосинтез хлорофиллов и каротиноидов, гашение синглетного кислорода. Ингибиторы митоза. Ингибиторы биосинтеза целлюлозы и липидов. Ингибиторы биосинтеза аминокислот: ингибиторы глутаминсинтазы, ацетолактатсинтазы и 5-енолпирувилшкимаат-3-фосфатсинтазы. Фосфонометилглицин и растения с генами устойчивости к нему.

Раздел 2. Инсектоакарициды.

2.1. Инсектоакарициды и их роль в сельском хозяйстве. Хлорорганические инсектициды, ДДТ и его аналоги. Пиретрины и пиретроиды, механизм инсектицидной активности, биорациональный подход к структуре пиретроидов. Полихлорпроизводные — гексахлоран, производные перхлорциклопентадиена. Экологические последствия применения персистентных хлорорганических препаратов. ГАМК-эргические инсектициды. Никотин и неоникотиноиды. Аналоги нерестиоксина. Фосфорорганические инсектициды и ингибиторы ацетилхолинэстеразы. Карбаматы. Разобшители окислительного фосфорилирования.

2.2. Регуляторы роста и развития насекомых. Ингибиторы биосинтеза хитина. Ювенильные гормоны, гормоны метаморфоза, ювеноиды и экдизоиды. Феромоны насекомых. Антифиданты, репелленты половые феромоны. Применение феромонов. Биологические способы борьбы с насекомыми-вредителями.

Раздел 3. Фунгициды и антимикотики.

3.1. Средства борьбы с патогенными грибами: фунгициды и антимикотики. Микотоксины и роль фунгицидов в сохранении сельскохозяйственной продукции. Факторы устойчивости растений. Элиситоры. Контактные фунгициды. Медьсодержащие, ртуть- и оловоорганические фунгициды. Дитиокарбаматы. Производные перхлормеркаптана. Гетероциклические контактные фунгициды.

3.2. Системные фунгициды. Вещества, нарушающие различные стадии окислительного фосфорилирования. Гетероарилкарбоанилиды. Стробилурин и его аналоги. Вещества, нарушающие биосинтез нуклеиновых кислот. Ацилаланины. Оксипиримидины. Фунгицидные антибиотики. Ингибиторы митоза. Бензимидазолы. Вещества, нарушающие биосинтез эргостерина. Триабольные и имидабольные фунгициды и антимикотики. Пиридины, пиримидины, пиперазины, морфолины. Вещества, нарушающие синтез липидов. Тиолфосфаты.

5. СООТВЕТСТВИЕ СОДЕРЖАНИЯ ТРЕБОВАНИЙ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

№	В результате освоения дисциплины студент должен:		Раздел 1	Раздел 2	Раздел 3
	Знать:				
1	– современные тенденции разработки и применения агрохимических препаратов;		+	+	+
2	– области применения, классификацию агрохимических препаратов;		+	+	+
3	– принципы и методы разработки биологически активных веществ с заданными свойствами;		+	+	+
4	– основные классы и их широко применяемых представителей гербицидов, регуляторов роста, инсектицидов, фунгицидов.		+	+	+
	Уметь:				
5	– анализировать различные методы синтеза агрохимических препаратов, выбрать наиболее технологически применимую схему получения действующего вещества;		+	+	+
6	– обосновать применение различных классов агрохимических препаратов в зависимости от особенностей применения, вида вредоносных организмов, возникновения резистентности;		+	+	+
7	– по химической структуре соединения выявить фармакофорные фрагменты и обосновать механизм действия агрохимических препаратов.		+	+	+
	Владеть:				
8	– методами синтеза широко применяемых представителей гербицидов, регуляторов роста, инсектицидов, фунгицидов;		+	+	+
9	– принципами разработки современных технологий агрохимических препаратов.		+	+	+
В результате освоения дисциплины студент должен приобрести следующие <i>профессиональные компетенции и индикаторы их достижения:</i>)					
	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК			
10	ПК-2. Способен к поиску, обработке, анализу и систематизации научно-технической информации по теме исследования, выбору методик и средств решения задачи.	ПК-2.1. Знает алгоритм поиска, оценки и анализа научно-технической информации.	+	+	+
11		ПК-2.2. Умеет обобщать и систематизировать научно-техническую информацию.	+	+	+

12		ПК-2.3. Владеет навыками соотнесения результатов собственной научной работы с отечественным и зарубежным опытом по тематике исследования.	+	+	+
13	ПК-4. Способен проводить поисковые исследования инновационных технологических процессов в области биологически активных веществ.	ПК-4.2. Умеет производить поисковые работы для разработки новых методов получения и анализа биологически активных веществ.	+	+	+
14	ПК-5. Способен осуществлять самостоятельные научные исследования в области химии и технологии биологически активных веществ.	ПК-5.1. Знает методы получения, особенности производства, свойства и механизмы действия биологически активных веществ различных классов.	+	+	+

6. ПРАКТИЧЕСКИЕ И ЛАБОРАТОРНЫЕ ЗАНЯТИЯ

6.1. Практические занятия

Примерные темы практических занятий по дисциплине.

№ п/п	№ раздела дисциплины	Темы практических занятий	Количество акад. часов
1		Введение Классификация агрохимических препаратов. Основные методы и подходы при разработке новых агрохимических препаратов.	1
2	1	Блокаторы транспорта электронов в фотосистеме II, акцепторы электронов в фотосистеме I. Синтез мочевиновых и триазиновых гербицидов	3
3		Синтез триазиновых гербицидов	3
4		Арилоксиуксусные кислоты. Технология получения.	3
5		Глифосат. Технология получения.	3
6	2	Хлорорганические инсектициды. Синтез ДДТ и его аналогов, полихлорпроизводных.	2
7		Синтез пиретроидов. Технология получения хризантемовой кислоты.	2
8		Синтез фосфорорганических инсектицидов. Технология получения диалкилхлортиофосфатов.	2
9		Синтез неоникотиноидов	2
10		Синтез ингибиторов биосинтеза хитина	1
11		Синтез ювеноидов и экдизоидов	1
12		Синтез феромонов. Технология получения	1
13	3	Синтез дитиокарбаматов.	1,5
14		Синтез производных перхлормеркаптана	1,5
15		Синтез карбоксаидов	2
16		Синтез аналогов стробилурина	1,5
17		Синтез ацилаланинов. Технология получения металаксила.	1,5
18		Синтез триазольных фунгицидов. Технология получения тебуконазола	2
Итого:			34

6.2. Лабораторные занятия

Выполнение лабораторного практикума учебным планом дисциплины «*Химия и технология агрохимических препаратов*» не предусмотрено.

7. САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА

Самостоятельная работа проводится с целью углубления знаний по дисциплине и предусматривает:

- регулярную проработку пройденного на лекциях и практических занятиях учебного материала;
- подготовку к контрольным работам по материалу лекционного курса;
- работу с рекомендованной учебной и научной литературой, работу с электронно-библиотечными системами, включая переводы публикаций из научных журналов, цитируемых в базах Scopus, Web of Science, Chemical Abstracts, РИНЦ;
- участие в семинарах РХТУ им. И. Менделеева по тематике курса;
- посещение отраслевых выставок, семинаров и конференций;
- подготовку к сдаче *экзамена* (2 семестр) по курсу.

Планирование времени на самостоятельную работу, необходимого на изучение дисциплины, студентам лучше всего осуществлять на весь период изучения, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала. Материал, законспектированный на лекциях, необходимо регулярно дополнять сведениями из литературных источников, представленных в учебной программе. При работе с указанными источниками рекомендуется составлять краткий конспект материала, с обязательным фиксированием библиографических данных источника.

8. ПРИМЕРЫ ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ КОНТРОЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Совокупная оценка по дисциплине складывается из оценок за выполнение контрольных работ (максимальная оценка 60 баллов) и итогового контроля в форме *экзамена* (максимальная оценка 40 баллов).

8.1. Примерная тематика реферативно-аналитической работы.

Выполнение реферативно-аналитической работы учебным планом дисциплины «Химия и технология агрохимических препаратов» не предусмотрено.

8.2. Примеры контрольных вопросов для текущего контроля освоения дисциплины

Для текущего контроля предусмотрено 3 контрольные работы (по одной контрольной работе: по разделу 1, по разделу 2 и по разделу 3). Максимальная оценка за контрольные работы №1, №2 и №3 (2 семестр) составляет 60 баллов, по 20 баллов за каждую контрольную работу.

Раздел 1. Фитоактивные соединения. Примеры вопросов к контрольной работе №1. Максимальная оценка – 20 баллов. Контрольная работа содержит 2 вопроса, по 10 баллов за вопрос.

1. Ауксины. Структура природных ауксинов, их функции в растениях и применение. Синтетические аналоги ауксинов. Механизм гербицидного действия. Связь структуры и фитотоксичности. Феноксикарбоновые кислоты и связь их структуры с активностью. Способы получения и применение 2,4-Д (2,4-дихлорфеноксиуксусной кислоты) и 2М-4Х (2-метил-4-хлорфеноксиуксусной кислоты). Экологические проблемы, связанные с переработкой хлорфенолов.

2. Гиббереллины, их функции в растениях. Применение гиббереллинов. Ретарданты, механизм действия и применение. Получение хлорхолинхлорида (триметил(2-хлорэтил)аммонийхлорида) и мепикват-хлорида (1,1-диметилпиперидинийхлорида). Этилен, его функции в растениях. Применение этилена. Ингибиторы образования этилена,

их применение. Этиленпродуценты, их применение. Получение этрела (2-хлорэтилфосфоновой кислоты).

Вариант 1.

1. Мочевинные гербициды, их механизм действия и способы получения. Получение диурона (1,1-диметил-3-(3,4-дихлорфенил)мочевины), флуометурона (1,1-диметил-3-(3-трифторметилфенил)мочевины) и линурона (1-метокси-1-метил-3-(3,4-дихлорфенил)мочевины).

2. Ингибиторы ацетолактатсинтазы. Биосинтез валина. Получение хлорсульфурона (1-(4-метокси-6-метил-1,3,5-триазин-2-ил)-3-(2-хлорфенил-сульфонил)мочевины) и метсульфурон-метила (метил-2-(4-метокси-6-метил-1,3,5-триазин-2-илкарбамоилсульфамоил)бензоата).

Раздел 2. Инсектоакарициды. Примеры вопросов к контрольной работе №2. Максимальная оценка – 20 баллов. Контрольная работа содержит 2 вопроса, по 10 баллов за вопрос.

1. Механизм действия хлорорганических инсектицидов. ДДТ и метоксиклор, их получение, дегидрохлорирование. Бромпропилат. Проблемы резистентности к хлорорганическим инсектицидам.

2. ГАМК-эргические инсектициды и их механизм действия. Гексахлорциклопентадиен. Циклодиеновые инсектициды. Синтез эндосульфана (1,2,3,4,7,7-гексахлорбицикло [2,2,1] гепт-2-ен-5,6-диилдиметиленсульфита).

Вариант 1.

1. Механизм действия ФОС. Активная и транспортная формы фосфорорганических инсектицидов. Арилдиалкилтиофосфаты. Способы получения диметилхлортиофосфата и диэтилхлортиофосфата. На примере паратиона (О,О диэтил-О-(4-нитрофенил)тиофосфат) и его аналогов показать пути модификации структуры с целью снижения токсичности для теплокровных. Синтез и метаболизм фентиона (О,О диметил-О-(3-метил-4-метилтиофенил)тиофосфата).

2. Ювенильный гормон и ювеноиды.. Стабильные ювеноиды. Методы синтеза метопрена (изопропиловый эфир (11-метокси-3,7,11-триметилдодека-2,4-диеновой кислоты) и феноксикарба (О этил N-(2-(4-феноксифенокс)этил)карбамата).

Раздел 3. Фунгициды и антимикотики. Примеры вопросов к контрольной работе №3. Максимальная оценка – 20 баллов. Контрольная работа содержит 2 вопроса, по 10 баллов за вопрос.

1. Поражение растений патогенными микроорганизмами. Особенности микотоксинов как фитоактивных соединений; роль как примесей в сельскохозяйственной продукции.. Природные защитные средства растений: прогибитины, ингибитины, постингибитины и фитоалексины. Синтез и особенности действия фосэтил-алюминия (трис-этилфосфоната алюминия) нарцисса (сукцинат глутамата хитозания).

2. Органические производные ртути и олова. Синтез и применение гранозана (этилмеркурхлорида) и брестана (трифенилоловоацетата). Механизмы действия. Экологические особенности использования.

Вариант 1.

1. Дитиокарбаматные фунгициды. Синтез тирама (тетраметилтиурамдисульфида) и цинеба (N,N'-этиленбис-(дитиокарбамата) цинка). Механизм действия.

2. Аналоги стробилурина. Синтез азоксистробина (метил (Е)-2-(2-[6-(2-цианофенокси)пиримидин-4-илокси]фенил)-3-метоксиакрилата) и крезоксим-метила (метил (Е)-2-метоксиимино-[2-(2-метилфеноксиметил)фенил]ацетата). Механизм действия, преимущества и недостатки стробилурина и его аналогов.

8.3 Вопросы для итогового контроля освоения дисциплины (2 семестр – экзамен).

Максимальное количество баллов за экзамен – 40 баллов. Контрольный билет содержит 3 вопроса.

1 вопрос – 13 баллов, вопрос 2 – 13 баллов и вопрос 3 – 14 баллов.

8.3.1. Примеры контрольных вопросов для итогового контроля освоения дисциплины (II семестр – экзамен).

Максимальное количество баллов за экзамен – 40 баллов.

1. Классификация фитоактивных веществ: регуляторов роста и гербицидов. Основные мишени гербицидов. Тенденции разработки фитоактивных веществ.

2. Способы борьбы с вредными растениями. Преимущества и недостатки химического метода. Классификация гербицидов. Избирательность действия гербицидов. Охрана окружающей среды.

Фонд оценочных средств приведен в виде отдельного документа, являющегося неотъемлемой частью основной образовательной программы.

8.4. Структура и примеры билетов для экзамена (2 семестр).

Экзамен по дисциплине «Химия и технология агрохимических препаратов» проводится во 2 семестре и включает контрольные вопросы по всем разделам учебной программы дисциплины. Билет для экзамена состоит из 3 вопросов, относящихся к указанным разделам. Ответы на вопросы экзамена оцениваются из максимальной оценки 40 баллов следующим образом: максимальное количество баллов за первый вопрос – 13 баллов, за второй – 13 баллов и за третий – 14 баллов.

Пример билета для экзамена:

«Утверждаю» зав. кафедрой ХТОС _____ С.В. Попков «__» _____ 20__ г.	Министерство образования и науки РФ
	Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева
	Кафедра химии и технологии органического синтеза
	18.04.01 – «Химическая технология» Магистерская программа – «Химия и технология биологически активных веществ»
	«Химия и технология агрохимических препаратов»
Экзаменационный билет № 1 1. Этилен, его аналоги, антагонисты и биологическая роль. Связь с ауксинами. Применение этилена и его антагонистов. Этиленпродуценты и их использование. Синтез этрела (2-хлорэтилфосфоновой кислоты). 2. Биосинтез эргостерина и его ингибирование производными азотсодержащих гетероциклов. Системные фунгициды в ряду производных триазола, содержащих 1,3-	

диоксолановый фрагмент. 1-(2-(2,4-Дихлорфенил)-4-пропил-1,3-диоксолан-2-илметил)-1,2,4-триазол (пропиконазол, тилт). Метод получения и практическое использование.

3. Проблема образования резистентных рас насекомых. Никотин и неоникотиноиды. Методы получения, активность и механизм действия 1-(6-хлорпиридин-3-илметил)-N-нитроимидазолидин-2-илиденамина (имидаклоприда) и 5-метил-N-нитро-3-(2-хлортиазол-5-илметил)-1,3,5-оксадиазинан-2-иленамина (тиометоксама).

9. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

9.1.Рекомендуемая литература

А. Основная литература

1. Коваленко Л.В., Ощепков М.С., Соловьева И.Н. Химия и биологическая активность фосфорорганических соединений: Учеб пособие/ М.: РХТУ им. Д.И.Менделеева, 2015. — 156 с.
2. Попков С.В., Кузенков А.В., Бурдейный М.Л., Захарычев В.В., Дашкин Р.Р., Шарипов М.Ю., Ярёмченко И.А. Получение синтетических биологически активных веществ и промежуточных продуктов Лабораторный практикум. – М.: РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2017, -144 с.
3. Захарычев, В. В. Химия гербицидов / В. В. Захарычев. — 2-е изд., стер. — Санкт-Петербург : Лань, 2022. — 592 с. — ISBN 978-5-8114-9935-9. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/201185> (дата обращения: 26.03.2022). — Режим доступа: для авториз. пользователей.
4. Захарычев, В. В. Грибы и фунгициды : учебное пособие для вузов / В. В. Захарычев. — 4-е изд., стер. — Санкт-Петербург : Лань, 2022. — 272 с. — ISBN 978-5-8114-8962-6. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/185951> (дата обращения: 26.03.2022). — Режим доступа: для авториз. пользователей.
5. Мельников Н.Н. Пестициды. Химия, технология и применение. / Н.Н. Мельников // М.: Химия, 1987. - 712 с.

Б. Дополнительная литература

1. Захарычев В.В. Фитогормоны, их аналоги и антагонисты в качестве гербицидов и регуляторов роста растений: Учеб пособие/ М.: РХТУ им. Д.И.Менделеева, 1999. — 56 с.
2. Захарычев В.В., Коваленко Л.В. Гербициды с негормональным механизмом действия: Учеб пособие/ М.: РХТУ им. Д.И.Менделеева, 2001. — 184 с.
3. Захарычев В.В., Гербициды и регуляторы роста растений. Основы биохимии и применения: Учеб пособие/ М.: РХТУ им. Д.И.Менделеева, 2007. — 204 с
4. Коваленко Л.В. Биохимические основы химии биологически активных веществ: Учеб. пособие - Москва: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2010. - 229 с
5. Коваленко Л.В. Современные инсектициды. Химия и практическое использование: Текст лекций. / М.: РХТУ им. Д.И.Менделеева, 1986. — 48 с.
6. Эллиот В., Эллиот Д. Биохимия и молекулярная биология: Пер. с англ. - М.: МАИК «Наука/Интерпериодика», 2002. – 446 с.

А. Основная литература

1. Коваленко Л.В., Ощепков М.С., Соловьева И.Н. Химия и биологическая активность фосфорорганических соединений: Учеб пособие/ М.: РХТУ им. Д.И.Менделеева, 2015. — 156 с.
2. Попков С.В., Кузенков А.В., Бурдейный М.Л., Захарычев В.В., Дашкин Р.Р., Шарипов М.Ю., Ярёмченко И.А. Получение синтетических биологически активных веществ и промежуточных продуктов Лабораторный практикум. – М.: РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2017, -144 с.

Б. Дополнительная литература

1. Мельников Н.Н. Пестициды. Химия, технология и применение. / Н.Н. Мельников // М.: Химия, 1987. - 712 с.
2. Коваленко Л.В. Современные инсектициды. Химия и практическое использование: Текст лекций. / М.: РХТУ им. Д.И.Менделеева, 1986. — 48 с.

3. Захарычев В.В. Фитогормоны, их аналоги и антагонисты в качестве гербицидов и регуляторов роста растений: Учеб пособие/ М.: РХТУ им. Д.И.Менделеева, 1999. — 56 с.

4. Захарычев В.В., Коваленко Л.В. Гербициды с негормональным механизмом действия: Учеб пособие/ М.: РХТУ им. Д.И.Менделеева, 2001. — 184 с.

5. Захарычев В.В., Грибы и фунгициды.: Учеб пособие/ М.: РХТУ им. Д.И.Менделеева, 2003. — 184 с.

6. Захарычев В.В., Гербициды и регуляторы роста растений. Основы биохимии и применения: Учеб пособие/ М.: РХТУ им. Д.И.Менделеева, 2007. — 204 с

7. Коваленко Л.В. Биохимические основы химии биологически активных веществ: Учеб. пособие - Москва: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2010. - 229 с

8. Эллиот В., Эллиот Д. Биохимия и молекулярная биология: Пер. с англ. - М.: МАИК «Наука/Интерпериодика», 2002. – 446 с.

9.2. Рекомендуемые источники научно-технической информации

- учебные пособия по дисциплине;
- раздаточный материал к разделам лекционного курса и к практическим занятиям по дисциплине;
- электронные презентации к разделам лекционного курса;
- справочные материалы в печатном и электронном виде;
- кафедральные библиотеки электронных изданий.

Научно-технические журналы:

- Журнал «Агрохимия» ISSN 0002-1881
- Pest. Management. Sci/
- J. Agr. Food. Chem.
- Eur. J. Med. Chem.

Ресурсы информационно–телекоммуникационной сети Интернет:

- <http://lib.muctr.ru/> - фонды учебной, учебно-методической, научной, периодической научно-технической литературы Информационно-библиотечного центра (ИБЦ) РХТУ им. Д. И. Менделеева;
- <http://www.muctr.ru/univsubs/infacol/hft/faculties/f4> - сайт кафедры химии и технологии органического синтеза

9.3. Средства обеспечения освоения дисциплины

Для реализации учебной программы подготовлены следующие средства обеспечения освоения дисциплины:

- компьютерные презентации интерактивных лекций – 16, (общее число слайдов – 486);

Для реализации учебной программы с использованием электронного обучения (ЭО) и дистанционных образовательных технологий (ДОТ) применяются следующие образовательные технологии и средства обеспечения дисциплины:

- ЕИОС РХТУ им. Д.И. Менделеева;
- платформы для проведения онлайн конференций (Zoom, Skype и др.);
- сервисы по доставки e-mail сообщений.

Для проведения промежуточных и итоговой аттестации могут использоваться такие сервисы как: Яндекс.Формы, Zoom, Skype, отдельные специализированные модули LMS.

10. ПЕРЕЧЕНЬ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ,

ИСПОЛЬЗУЕМЫХ В ОБРАЗОВАТЕЛЬНОМ ПРОЦЕССЕ

Информационную поддержку изучения дисциплины осуществляет Информационно-библиотечный центр (ИБЦ) РХТУ им. Д.И. Менделеева, который обеспечивает обучающихся основной учебной, учебно-методической и научной литературой, необходимой для организации образовательного процесса по дисциплине. Общий объем многоотраслевого фонда ИБЦ на 01.01.2024 составляет 1 559 436 экз.

Фонд ИБЦ располагает учебной, учебно-методической и научно-технической литературой в форме печатных и электронных изданий, а также включает официальные, справочно-библиографические, специализированные отечественные и зарубежные периодические и информационные издания. ИБЦ обеспечивает доступ к профессиональным базам данных, информационным, справочным и поисковым системам.

Каждый обучающийся обеспечен свободным доступом из любой точки, в которой имеется доступ к сети Интернет и к электронно-библиотечной системе (ЭБС) Университета, которая содержит различные издания по основным изучаемым дисциплинам и сформирована по согласованию с правообладателями учебной и учебно-методической литературы.

Для более полного и оперативного справочно-библиографического и информационного обслуживания в ИБЦ реализована технология Электронной доставки документов.

Полный перечень электронных информационных ресурсов, используемых в процессе обучения, представлен в основной образовательной программе.

11. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

В соответствии с учебным планом занятия по дисциплине *«Химия и технология агрохимических препаратов»* проводятся в форме лекций и самостоятельной работы обучающегося.

11.1. Оборудование, необходимое в образовательном процессе:

Лекционная учебная аудитория, оборудованная электронными средствами демонстрации (компьютер со средствами звуковоспроизведения, проектор, экран) и учебной мебелью.

Библиотека, имеющая рабочие места, оснащенные компьютерами с доступом к базам данных и выходом в Интернет.

11.2. Учебно-наглядные пособия:

Учебные пособия по дисциплине.

Электронные презентации к разделам лекционного курса.

Справочные материалы в печатном и электронном виде.

Кафедральные библиотеки электронных изданий.

11.3. Компьютеры, информационно-телекоммуникационные сети, аппаратно-программные и аудиовизуальные средства:

Персональные компьютеры, укомплектованные проигрывателями CD и DVD, принтерами и программными средствами.

Проекторы и экраны.

Копировальные аппараты.

Локальная сеть с выходом в Интернет.

11.4. Печатные и электронные образовательные и информационные ресурсы:

Информационно-методические материалы: учебные пособия по дисциплине.

Электронные образовательные ресурсы: учебно-методические разработки в электронном виде; справочные материалы в печатном и электронном виде; кафедральная библиотека электронных изданий.

11.5. Перечень лицензионного программного обеспечения:

Полный перечень лицензионного программного обеспечения представлен в основной образовательной программе.

№ п.п.	Наименование программного продукта	Реквизиты договора поставки	Срок окончания действия лицензии
1.	WINDOWS 8.1 Professional Get Genuine	Контракт № 62-64ЭА/2013 от 02.12.2013	бессрочно
2.	Micosoft Office Standard 2013	Контракт № 62-64ЭА/2013 от 02.12.2013	бессрочная
3.	WINHOME 10 Russian OLV NL Each AcademicEdition	Контракт № 28-35ЭА/2020 от 26.05.2020	бессрочно
4.	Microsoft Office Standard 2019 В составе: • Word • Excel • Power Point • Outlook	Контракт №175- 262ЭА/2019 от 30.12.2019	12 месяцев (ежегодное продление подписки с правом перехода на обновлённую версию продукта)
5.	Kaspersky Endpoint Security для бизнеса – Стандартный Russian Edition.	Договор № 99-155ЭА-223/2024	12 месяцев (ежегодное продление подписки с правом перехода на обновлённую версию продукта)

12. ТРЕБОВАНИЯ К ОЦЕНКЕ КАЧЕСТВА ОСВОЕНИЯ ПРОГРАММЫ

Наименование модулей	Основные показатели оценки	Формы и методы контроля и оценки
Раздел 1. Фитоактивные соединения.	<i>Знает:</i> – современные тенденции разработки и применения фитоактивных препаратов; – области применения, классификацию фитоактивных препаратов; – принципы и методы разработки биологически активных веществ с заданными свойствами; – основные классы и их широко применяемых представителей гербицидов, регуляторов роста;	Оценка за контрольную работу №1 (2 семестр) Оценка за экзамен (2 семестр).

	<i>Умеет:</i> – анализировать различные методы синтеза фитоактивных препаратов, выбрать наиболее технологически применимую схему получения действующего вещества; – обосновать применение различных классов фитоактивных препаратов в зависимости от особенностей применения, вида вредоносных организмов, возникновения резистентности; – по химической структуре соединения выявить фармакофорные фрагменты и обосновать механизм действия фитоактивных препаратов; <i>Владеет:</i> – методами синтеза широко применяемых представителей гербицидов, регуляторов роста; – принципами разработки современных технологий фитоактивных препаратов.	
Раздел 2. Инсектоакарициды.	<i>Знает:</i> – современные тенденции разработки и применения инсектоакарицидов; – области применения, классификацию инсектоакарицидов; – принципы и методы разработки биологически активных веществ с заданными свойствами; – основные классы и их широко применяемых представителей инсектоакарицидов; <i>Умеет:</i> – анализировать различные методы синтеза инсектоакарицидов, выбрать наиболее технологически применимую схему получения действующего вещества; – обосновать применение различных классов инсектоакарицидов в зависимости от особенностей применения, вида вредоносных организмов, возникновения резистентности; – по химической структуре соединения выявить фармакофорные фрагменты и обосновать механизм действия инсектоакарицидов; <i>Владеет:</i> – методами синтеза широко применяемых представителей	Оценка за контрольную работу №2 (2 семестр) Оценка за экзамен (2 семестр).

	инсектоакарицидов; – принципами разработки современных технологий инсектоакарицидных препаратов.	
Раздел 3. Фунгициды и антимикотики.	<i>Знает:</i> – современные тенденции разработки и применения фунгицидных препаратов; – области применения, классификацию фунгицидных препаратов; – принципы и методы разработки биологически активных веществ с заданными свойствами; – основные классы и их широко применяемых представителей фунгицидов; <i>Умеет:</i> – анализировать различные методы синтеза фунгицидных препаратов, выбрать наиболее технологически применимую схему получения действующего вещества; – обосновать применение различных классов фунгицидных препаратов в зависимости от особенностей применения, вида вредоносных организмов, возникновения резистентности; – по химической структуре соединения выявить фармакофорные фрагменты и обосновать механизм действия фунгицидных препаратов; <i>Владеет:</i> – методами синтеза широко применяемых представителей фунгицидных препаратов; – принципами разработки современных технологий фунгицидных препаратов.	Оценка за контрольную работу №3 (2 семестр) Оценка за экзамен (2 семестр).

13. ОСОБЕННОСТИ ОРГАНИЗАЦИИ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО ПРОЦЕССА ДЛЯ ИНВАЛИДОВ И ЛИЦ С ОГРАНИЧЕННЫМИ ВОЗМОЖНОСТЯМИ ЗДОРОВЬЯ

Обучение инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья осуществляется в соответствии с:

- Порядком организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры (Приказ Министерства науки и высшего образования Российской Федерации от 06.04.2021 № 245);

- Положением о порядке организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева», принятым решением Ученого совета РХТУ им. Д.И. Менделеева от 28.12.2022, протокол № 5;

- Методическими рекомендациями по организации образовательного процесса для обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья в образовательных организациях высшего образования, в том числе оснащенности образовательного процесса (утверждены заместителем Министра образования и науки РФ А.А. Климовым от 08.04.2014 № АК-44/05вн).

**Дополнения и изменения к рабочей программе дисциплины
«Химия и технология агрохимических препаратов»**

основной образовательной программы

Направление подготовки 18.04.01 – Химическая технология
Магистерская программа «Химия и технология биологически активных веществ»

Форма обучения: очная

Номер изменения/ дополнения	Содержание дополнения/изменения	Основание внесения изменения/дополнения
1.		протокол заседания Ученого совета № _____ от «___» _____ 20__ г.
		протокол заседания Ученого совета № _____ от «___» _____ 20__ г.
		протокол заседания Ученого совета № _____ от «___» _____ 20__ г.
		протокол заседания Ученого совета № _____ от «___» _____ 20__ г.
		протокол заседания Ученого совета № _____ от «___» _____ 20__ г.



РХТУ им. Д.И. Менделеева
ДОКУМЕНТ ПОДПИСАН ПРОСТОЙ
ЭЛЕКТРОННОЙ ПОДПИСЬЮ

Владелец: *Комарницкая Елена Анатольевна*
Проректор по образованию,
Ректорат

Подписан: 01:09:2025 14:59:55