

КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

Інститут високих технологій
Кафедра супрамолекулярної хімії



«ЗАТВЕРДЖУЮ»
Заступник директора
з науково-педагогічної роботи
Галина ГРАБЧУК
«22» березня 2022 року

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Методи дослідження біологічних процесів

(повна назва навчальної дисципліни)

галузь знань 10 Природничі науки
(шифр і назва)
спеціальність 102 Хімія
(шифр і назва спеціальності)
освітній рівень бакалавр
(бакалавр, магістр)
освітньо-наукова програма Хімія (високі технології)
(назва освітньої програми)
спеціалізація _____
(назва спеціалізації)
вид дисципліни **вибіркова**

Форма навчання	<u>денна</u>
Навчальний рік	<u>2022/2023</u>
Семестр	<u>восьмий</u>
Кількість кредитів ECTS	<u>3</u>
Мова викладання, навчання та оцінювання	<u>українська</u>
Форма заключного контролю	<u>іспит</u>

Викладач: д.х.н., проф. Комаров І.В.

(Науково-педагогічні працівники, які забезпечують викладання даної дисципліни у відповідному навчальному році)

Пролонговано: на 20__/20__ н.р. _____ (_____) «__» 20__ р.
(підпис, ПІБ, дата)

на 20__/20__ н.р. _____ (_____) «__» 20__ р.
(підпис, ПІБ, дата)

КИЇВ – 2022

Розробник: д.х.н., проф. Комаров І.В.

ЗАТВЕРДЖЕНО

Зав. кафедри супрамолекулярної хімії

_____ (Сергій РЯБУХІН)

(підпис)

(прізвище та ініціали)

Протокол № 5 від «11» травня 2022р.

Схвалено науково - методичною комісією Інституту високих технологій

Протокол № 4 від «13» травня 2022 року

Голова науково-методичної комісії

(підпис)



(Наталя РУСІНЧУК)

(прізвище та ініціали)

1. Мета дисципліни:

Засвоєння студентами основних теоретичних положень методів ЯМР, ІЧ, Раманівської, електронної спектроскопії і мас спектрометрії, одержання практичних навичок з інтерпретації відповідних спектрів і їх використанню для встановлення складу і будови хімічних сполук, зокрема, біомолекул (протеїнів, ліпідів, нуклеїнових кислот) та їх перетворень у біологічних процесах.

2. Попередні вимоги до опанування або вибору навчальної дисципліни :

Студент повинен знати:

Основи фізики, біології, загальної, неорганічної та органічної хімії.

Студент повинен вміти:

Користуватися сучасними електронними Інтернет-ресурсами, що є у відкритому доступу, зокрема, довідковими даними, що стосуються фізичних методів дослідження хімічних сполук.

3. Анотація навчальної дисципліни

Навчальна дисципліна присвячена вивченню методів дослідження хімічних сполук і процесів їх перетворень, що базуються на фізичних явищах. Ці методи сьогодні є невід'ємною частиною сучасної науки. Вони широко використовуються для встановлення складу і будови хімічних сполук, при дослідженні біологічних процесів. Цьому сприяє поява нової сучасної апаратури і комп'ютерних методів обробки спектрів, що значно розширює можливості спектральних методів. Особлива увага приділяється засвоєнню студентами практичних навичок з інтерпретації експериментальних даних, та плануванню експериментальних досліджень виходячи з конкретних завдань. Протягом курсу в контексті досліджень біомолекул (протеїнів, ліпідів, нуклеїнових кислот) наводяться типові алгоритми досліджень їх складу і будови, їх хімічних перетворень.

4. Завдання (навчальні цілі)

Сформувані у студентів ґрунтовні знання з фізичних методів дослідження хімічних сполук, навички інтерпретації спектральних даних з метою встановлення складу і будови хімічних сполук, зокрема, біомолекул (протеїнів, ліпідів, нуклеїнових кислот).

Навчання дисципліни має на меті розвинути у студентів такі компетентності:

ЗК01. Знання та розуміння предметної області та розуміння професійної діяльності.

ЗК02. Здатність вчитися та оволодівати сучасними знаннями.

ЗК07. Здатність спілкуватися з представниками інших професійних груп різного рівня (з експертами з інших галузей знань/видів економічної діяльності).

ЗК10. Здатність до пошуку, критичного аналізу та обробки інформації з різних джерел

ЗК11. Здатність бути критичним і самокритичним.

ФК01. Здатність застосовувати знання і розуміння математики та природничих наук для вирішення якісних та кількісних проблем в хімії.

	ресурсами.			
3.	<i>Вміти працювати в групі на практичних роботах</i>	<i>Лабораторні заняття</i>	<i>Звіти</i>	<i>10%</i>
4.	<i>Вміти самостійно працювати з навчально-методичною літературою, здійснювати пошук та узагальнення науково-технічної інформації.</i>	<i>Самостійна робота</i>	<i>Контрольна робота</i>	<i>10%</i>

6. Співвідношення результатів навчання дисципліни із програмними результатами навчання

Результати навчання дисципліни	1.1	1.2	2.1	3.1	4.1
Програмні результати навчання					
ПРН26. Розуміти зміну/появу біологічної функції при перебігу біохімічних перетворень.	+	+	+	+	+

7. Схема формування оцінки.

7.1 Форми оцінювання:

- семестрове оцінювання:

1. Модульна контрольна робота 1 – РН 1.– 20 балів/ 12 балів
2. Модульна контрольна робота 2 – РН 1.– 20 балів/ 12 балів
3. Практичні та семінари– РН 2., 3.– 12 балів/ 7 балів
4. Проміжне тестування РН 4. – 8 балів/ 5 балів

- підсумкове оцінювання: у формі заліку

Формою проведення заліку є тестова контрольна робота. Результатами навчання, які оцінюються в тестовій контрольній роботі, є РН 1. Максимальна кількість балів, які можуть бути отримані студентом, становить 40 балів.

- умови допуску до підсумкового заліку:

Студент допускається до заліку за умови виконання всіх передбачених планом практичних завдань. Студент не допускається до заліку, якщо під час семестру набрав менше, ніж 20 балів

7.2 Організація оцінювання:

Модульні контрольні роботи проводяться після завершення лекцій з відповідних розділів. Проміжне тестування проводиться упродовж лекційного курсу. Звіти у формі опитування проводяться після кожного практичного заняття. Оцінювання роботи студентів з рішення задач проводиться на практичних заняттях у формі контрольної роботи.

7.3 Шкала відповідності оцінок

Відмінно / Excellent	90-100
Добре / Good	75-89
Задовільно / Satisfactory	60-74
Незадовільно / Fail	0-59
Зараховано / Passed	60-100
Не зараховано / Fail	0-59

8. Структура навчальної дисципліни.

Тематичний план лекцій та практичних занять

Номер і назва теми*	Кількість годин		
	лекції	лабораторні заняття	Самостійна робота
Розділ 1			
<p>Тема 1. Поняття про фізичні методи дослідження, основні терміни, класифікація методів, їх загальний огляд. (Спектроскопічні, дифракційні методи дослідження, та методи, що базуються на перетворенні речовин, що досліджуються, в йони. Діапазони частот (довжин хвиль) для різних спектроскопічних методів дослідження (гама-резонансної спектроскопії, рентгенівській, фотоелектронній, електронній, коливальній, обертальній спектроскопії, методах ЕПР, ЯМР та ЯКР). Прямі та обернені спектральні задачі. Характеристичний час фізичних методів дослідження. Значення фізичних методів для теорії та практики хімії, сучасний стан в даній галузі та перспективи її розвитку.)</p>	2		2
<p>Тема 2. Основні принципи мас-спектрометрії. (Одиниці виміру і форми представлення мас-спектрів. Принципова блок-схема мас-спектрометра. Йонізація в мас-спектрометрії електронним ударом (ЕУ). Основні процеси, що відбуваються при ЕУ. Хімічна йонізація та області її аналітичного застосування. Методи йонізації лабільних молекул (польова йонізація, польова десорбція, FAB, електроспрей-йонізація) та їх порівняння з методом ЕУ. Основні методи аналізу йонів – магнітний, часопротітний, квадрупольний. Роздільна здатність мас-спектрометра. Мас-спектроскопія високої роздільної здатності. Типи йонів у мас-спектрі: молекулярний йон, уламкові йони, перегруповані, метастабільні, двозарядні та ізотопні йони. Визначення бруто-формули, виходячи з даних мас-спектрометрії: за допомогою точного значення маси молекулярного йону)</p>	2		2

<p>Тема 3. Застосування мас-спектрометрії для визначення складу і будови хімічних сполук. (Основні правила розшифрування мас-спектрів (азотне правило, правила фрагментації йонів). Характеристичні йони та характерні фрагментації (на прикладі основних класів органічних сполук – вуглеводнів, галогенпохідних вуглеводнів, спиртів, етерів, альдегідів, кетонів, карбонових кислот, нітрilів, естерів, амінів, гетероциклічних сполук). Найбільш характеристичні фрагментації молекулярних йонів з відщепленням нейтральних частинок. Характеристичні перегруповання йонів. Перегрупування Мак-Лаферті.)</p>	2		4
<p>Лабораторне заняття 1. Технічні аспекти зйомки мас-спектрів, принципи їх інтерпретації .</p>		2	4
<p>Розділ 2</p>			
<p>Тема 4. Фізичні явища, що лежать в основі ЯМР. Основні принципи методу. (Характеристика магнітних ядер (спін, магнітний момент, гіромагнітне відношення). Взаємодія магнітних моментів ядер з магнітним полем. Ядерна прецесія. Моделі, що використовуються для ілюстрації поведінки магнітних ядер в постійному магнітному полі. Макроскопічна ядерна намагніченість, залежність від температури та напруженості зовнішнього магнітного поля. Спін-граткова і спін-спінова релаксація, час релаксації. Розподілення ядер між рівнями енергії в зовнішньому магнітному полі (розподілення Больцмана). Умови ядерного магнітного резонансу. Основне рівняння ЯМР, форма сигналу ЯМР. Способи реєстрації сигналу ЯМР – метод повільного проходження та Фур'є-спектроскопія. Розчинники в ЯМР та вимоги до них.)</p>	2		2

<p>Тема 5. Хімічний зсув сигналів ЯМР: зв'язок з будовою хімічних сполук. (Хімічне зміщення сигналу ЯМР, константа екранування ядер. Одиниці вимірювання хімічного зсуву в спектроскопії ЯМР. Поняття про ізохронні, хімічно (не)еквівалентні, магнітно (не)еквівалентні ядра. Еталонні речовини в спектроскопії ЯМР та вимоги до них, шкали хімічних змишень. Залежність хімічного зсуву від будови речовин (на прикладі ^1H-ЯМР та ^{13}C-ЯМР. Магнітно-анізотропні групи, їх вплив на навколишні ядра. Кільцеві ароматичні токи, їх вплив на резонанс навколишніх ядер. Використання хімічного зсуву в структурних дослідженнях. Кореляційні таблиці хімічних зсувів.)</p>	2		2
<p>Тема 6. Спін-спінова взаємодія: її прояв в спектрах ЯМР, використання. (Спін-спінова взаємодія, її прояв в спектрах ЯМР. Мультиплетність сигналів ЯМР. Правила розщеплення ЯМР сигналів першого порядку. Константи спін-спінової взаємодії (КССВ), їх класифікація в залежності від кількості зв'язків між магнітними ядрами. Позначення спінових систем. Типовий вигляд сигналів ЯМР спінових систем AX, AB, AMX, ABC, AA'BB', AA'XX'. ЯМР Магнітних ядер в діастереотопних групах. Ефекти вищого порядку в спектрах ЯМР. Залежність КССВ від геометрії молекул. Формула Карплуса.)</p>	2		2
<p>Тема 7. Основні параметри спектрів ^1H-ЯМР – аналіз прикладів. (Аналіз типових спектрів ЯМР на ядрах ^1H. Знаходження та практичне використання параметрів ЯМР для дослідження складу та будови хімічних сполук.)</p>	2		4
<p>Лабораторне заняття 2. Технічні деталі отримання ЯМР-спектрів. Розв'язування задач з інтерпретації спектрів ЯМР на ядрах ^1H та ^{13}C.</p>		2	4
<p>Тема 8. Спеціальні методики в ЯМР. Декаплінг. Ядерний ефект Оверхаузера. Динамічні ефекти в ЯМР. (Подвійний резонанс, практичне використання в ЯМР. Явище насичення в ЯМР, практичне застосування. Ефект Оверхаузера, практичне застосування. Шкала часу в ЯМР; швидкі та повільні процеси з точки зору ЯМР. Практичне знаходження константи швидкості обмінного процесу за спектрами ЯМР.)</p>	2		2

<p>Тема 9. Двовимірні методики в ЯМР. Типи двовимірних спектрів. (Поняття про двовимірну спектроскопію ЯМР. Принципова відмінність двовимірних спектрів ЯМР від одновимірних. Типи двовимірних спектрів. Двовимірні кореляційні спектри: методики COSY, TOCSY, HSQC, HMBC, NOESY, INADEQUATE. Способи зображення двовимірних спектрів. Двовимірна J-спектроскопія – кореляція хімічних зсувів з константами спін-спінової взаємодії. Типи задач у хімії і біології, що можуть бути розв’язані за допомогою двовимірних кореляційних спектрів. Приклади)</p>	2		2
<p>Лабораторне заняття 3. Розв’язування задач з інтерпретації двовимірних спектрів ЯМР.</p>		2	4
<p>Тема 10. Використання ІЧ-спектроскопії в хімічних і біологічних дослідженнях. (Використання концепції групових (характеристичних) коливань для аналізу ІЧ спектрів. Характеристичні коливання. Фактори, які впливають на значення характеристичних частот. Кореляційні таблиці. Характеристика окремих областей ІЧ спектрів. Приклади інтерпретації ІЧ-спектрів)</p>	2		2
<p>Тема 11. Електронна спектроскопія. (Детермінація поняття електронна спектроскопія. Електромагнітний спектр поглинання та його області. Діапазон спектру, що відповідає за електронні переходи (а саме за переходи валентних електронів). Зв’язок з іншими видами спектроскопії, зокрема з ІЧ спектроскопією. Енергія та частота електромагнітного випромінювання. Електронна, коливальна та оберտальна складові енергії. Енергетичні підрівні. Зв’язок з фізикою та квантовою хімією. Фізична природа забарвлення речовини. Основні та додаткові кольори. Природа УФ та видимого спектру. Основні закони поглинання оптичного випромінювання: закон Бугера-Ламберта, закон Бера та об’єднаний закон Бугера-Ламберта-Бера. Крива спектру поглинання. Приклади електронних спектрів неорганічних та органічних сполук. Практичні аспекти використання електронної спектроскопії. Використання електронної спектроскопії для ідентифікації хімічних речовин та аналізу двокомпонентних сумішей. Яскраві приклади використання у біології. Ілюстрація спектру гемоглобіну.)</p>	2		2

Тема 12. Раманівська спектроскопія та мікроскопія. (історія відкриття та теорія Раманівської спектроскопії (спектроскопії комбінаційного розсіювання, КР). Блок-схема приладу. Типові спектри КР, принципи їх інтерпретації. Ідентифікація сполук за допомогою КР. Порівняння ІЧ та Раманівської спектроскопій. Раманівська мікроскопія, Раманівська томографія, підсилена поверхнею Раманівська спектроскопія, підсилена шупом Раманівська спектроскопія. Вивчення біооб'єктів методом КР.)	2		2
Лабораторне заняття 4. Задачі з інтерпретації ІЧ-спектрів.		4	4
Тема 13. Сучасні стратегії розв'язання структурних задач в хімії і біології за допомогою фізичних методів дослідження. (Розгляд прикладів).	2		
Тема 14. Дослідження будови протеїнів. (Розгляд прикладів).	2		
Лабораторне заняття 5. Комбіновані задачі (розшифровка структури невідомих сполук з використанням мас-спектрометрії, ЯМР, ІЧ, електронної спектроскопії).		4	4

Загальний обсяг *90 год.*, в тому числі:

Лекції – *28 год*

Практичні – *14 год.*

Самостійна робота – *48 год.*

9. Рекомендовані літературні джерела:

Основна:

1. Воловенко Ю.М., Комаров І.В., Туров О.В., Хиля В.П. Спектроскопія ядерного магнітного резонансу для хіміків. Видавництво Київського університету, Київ, 2017 р., 685 с.
2. Воловенко Ю.М., Комаров І.В., Туров О.В., Хиля В.П. Практикум зі спектроскопії ЯМР. Видавництво Київського університету, Київ, 2016 р., 335 с.

Додаткова:

1. Spectroscopic Methods of Analysis: Methods and Protocols (Methods in Molecular Biology, 875) by Wlodek M. Bujalowski (Editor). Springer 2012