

Приложение 7
УТВЕРЖДЕНО
приказом ФИЦ КазНЦ РАН
01.03.2019 № 7-А

Разработано и рекомендовано к утверждению
Ученым советом ИОФХ им. А.Е. Арбузова -
обособленного структурного подразделения
ФИЦ КазНЦ РАН
«27» февраля 2019 г., протокол № 3

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ ПО ВЫБОРУ

«Супрамолекулярная химия»

Уровень высшего образования
Подготовка кадров высшей квалификации
Направление подготовки

04.06.01 ХИМИЧЕСКИЕ НАУКИ

Направленность подготовки:

Органическая химия (02.00.03)

Физическая химия (02.00.04)

Квалификация выпускника:

Исследователь. Преподаватель-исследователь

СОДЕРЖАНИЕ

1. Виды учебной деятельности, способ и формы ее проведения, трудоемкость дисциплины.
2. Перечень планируемых результатов обучения.
3. Место дисциплины в структуре образовательной программы.
4. Содержание дисциплины.
5. Учебно-тематический план занятий
6. Формы текущего и итогового контроля, критерии оценки.
7. Перечень учебной литературы и ресурсов сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины.
8. Описание материально-технической базы, необходимой для освоения дисциплины.

1. ВИДЫ УЧЕБНОЙ ДЕЯТЕЛЬНОСТИ, СПОСОБ И ФОРМЫ ЕЕ ПРОВЕДЕНИЯ, ТРУДОЕМКОСТЬ ДИСЦИПЛИНЫ

Виды учебной деятельности: аудиторные занятия - 1 зачетная единицы труда (36 часов), самостоятельная работа – 4 зачетных единиц труда (144 часа), всего – 5 зачетных единиц труда (180 часов).

Форма проведения аудиторных занятий – лекции и консультации.

В рамках часов самостоятельной работы по указанию преподавателя аспиранты прорабатывают темы и осваивают теоретические вопросы, излагаемые в лекционном курсе, а также самостоятельно изучают другие вопросы программы.

Формой итогового контроля является зачет.

2. ПЕРЕЧЕНЬ ПЛАНИРУЕМЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ ОБУЧЕНИЯ

В результате освоения дисциплины выпускник должен обладать следующими компетенциями:

2.1 Универсальные компетенции:

- способность к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях (УК-1);
- способность проектировать и осуществлять комплексные исследования, в том числе междисциплинарные, на основе целостного системного научного мировоззрения с использованием знаний в области истории и философии науки (УК-2);
- готовность участвовать в работе российских и международных исследовательских коллективов по решению научных и научно-образовательных задач (УК-3);
- готовность использовать современные методы и технологии научной коммуникации на государственном и иностранном языках (УК-4).

3.2 Обще-профессиональные компетенции:

- готовность к преподавательской деятельности по основным образовательным программам высшего образования (ОПК-3).

3.3 Профессиональные компетенции для направленности (профиля) подготовки Органическая химия (02.00.03):

- способность собирать и анализировать мировые научные знания о фундаментальных основах современной органической химии и формулировать направления самостоятельных исследований (ПК-1);
- владение основами современных методов экспериментальной органической химии (ПК-2);
- способность обобщать и анализировать полученные результаты и представлять их в виде научных публикаций (ПК-3);

- способность к установлению структуры и исследованию реакционной способности органических соединений (ПК-4);
- готовность к направленному синтезу соединений с полезными свойствами или новыми структурами (ПК-5).

3.4 Профессиональные компетенции для направленности (профиля) подготовки Физическая химия (02.00.04):

- способность собирать и анализировать мировые научные знания о фундаментальных основах современной физической химии и формулировать направления самостоятельных исследований (ПК-1);
- владение основами современных методов экспериментальной физической химии (ПК-2);
- способность обобщать и анализировать полученные результаты и представлять их в виде научных публикаций (ПК-3)
- способность к выявлению и установлению закономерностей, определяющих строение веществ, направление и скорость химических превращений при различных внешних условиях; о количественных взаимодействиях между химическим составом, структурой вещества и его свойствами (ПК-4).

3. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ

Дисциплина «Супрамолекулярная химия» является дисциплиной по выбору и включена в Блок № 1 программы аспирантуры, относящийся к вариативной части основной профессиональной образовательной программы высшего образования – программы подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре по направлению подготовки 04.06.01 Химические науки, направленности III(профиля) подготовки Органическая химия (02.00.03) и Физическая химия (02.00.04). Обучение проводится на втором курсе.

Данная дисциплина базируется на знаниях и умениях, выработанных при прохождении общих профессиональных курсов «Органическая химия», «Физическая химия» в рамках магистерской программы образования или специалитета. Владением данными знаниями и умениями устанавливается в ходе вступительных испытаний в аспирантуру.

Аспирант должен обладать навыками самостоятельного освоения изучаемого материала.

В результате освоения дисциплины аспирант должен получить дополнительные знания, умения и навыки. Аспирант должен:

Знать:

- современные теории молекулярного распознавания, супрамолекулярных ансамблей, сенсоров и переключателей.

Владеть:

- глубокими, специализированными знаниями, на основе которых осуществляется критический анализ, оценка и синтез инновационных идей.

Уметь:

- критически анализировать научную литературу с целью самостоятельного выбора направления исследования, самостоятельно составлять план исследования; участвовать в научных дискуссиях.

4. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

4.1. От молекулярной к супрамолекулярной химии

Понятия и язык супрамолекулярной химии: что такое супрамолекулярная химия, химия «хозяин - гость», развитие представлений. Классификация супрамолекулярных соединений «хозяин - гость». Рецепторы, координация и аналогия «замок-ключ». Хелатный и макроциклический эффекты. Предорганизация и комплементарность. Термодинамическая и кинетическая селективность.

Невалентные взаимодействия. Природа супрамолекулярных взаимодействий: ион-ионные, ион-дипольные, диполь-дипольные, водородная связь, катион – пи-взаимодействия, пи-пи Стэкинг-взаимодействия; силы Ван-дер-Ваальса, плотная упаковка в твердом состоянии, гидрофобные эффекты водных растворах. Супрамолекулярное конструирование хозяина.

Молекулярное распознавание, комплементарность. Молекулярные рецепторы - принципы дизайна. Связывание и распознавание нейтральных молекул. Координационная химия анионов и распознавание анионных субстратов. Координационная химия ионов металлов и их распознавание.

4.2. Процессы переноса и создание носителей

Транспорт при посредничестве носителей. Перенос катионов. Носители катионов. Перенос анионов. Носители анионов. Сопряженные процессы переноса. Электрон-сопряженный перенос в окислительно-восстановительном градиенте. Протон-сопряженный перенос в pH-градиенте. Фотосопряженные процессы переноса. Перенос через трансмембранные каналы. Связывание нейтральных молекул.

4.3. Молекулярные и супрамолекулярные устройства

Молекулярное распознавание, информация, сигналы. Супрамолекулярная фотохимия. Молекулярные и супрамолекулярные фотонные устройства. Преобразование света и устройства передачи энергии. Фоточувствительные молекулярные рецепторы. Фотоиндуцированный перенос электрона в фотоактивных устройствах. Фотоиндуцированные реакции в супрамолекулярных ансамблях.

Нелинейные оптические свойства супрамолекулярных ансамблей. Молекулярные и супрамолекулярные электронные устройства.

Супрамолекулярная электрохимия. Электропроводящие устройства. Молекулярные провода. Поляризованные молекулярные провода. Выпрямительные устройства. Модифицированные и переключаемые молекулярные провода.

Молекулярные магнитные устройства. Молекулярные и супрамолекулярные ионные устройства. Ионно-чувствительные монослои. Молекулярная протоника. Ионные и молекулярные сенсоры. Переключающие устройства. Сигналы и информация. Фотопереключающие устройства. Электропереключающие устройства. Включение ионных и молекулярных процессов. Процессы механического включения/выключения.

4.4. Самопроцессы - запрограммированные супрамолекулярные наноразмерные системы

Самосборка. Молекулярная сборка “снизу вверх”. Самоорганизация. Запрограммированные, интеллектуальные супрамолекулярные наноразмерные системы.

Самосборка неорганических структур. Многокомпонентная самосборка. Супрамолекулярная самосборка с использованием координации ионов металлов.

Самосборка органических супрамолекулярных структур. Самосборка за счет водородных связей. Сборка организованных фаз, направляемая молекулярным распознаванием. Супрамолекулярные материалы. Нанохимия.

4.5. Инженерия кристаллов

Инженерия кристаллов. Общие вопросы: межмолекулярные взаимодействия, особая роль водородных связей, рост кристаллов, разрушение кристаллов, стратегии дизайна при инженерии кристаллов. Координационные полимеры.

Биомиметика. Биомиметические (биоподражательные) структуры. Супрамолекулярная биохимия. Характеристика биологических моделей. Аналоги гема: модели связывания и транспорта кислорода. Модели цитохрома P-450.

5. УЧЕБНО-ТЕМАТИЧЕСКИЙ ПЛАН ЗАНЯТИЙ

№ п/п	Наименование темы	Аудиторные занятия	Самост. работа	Всего часов
4.1.	От молекулярной к супрамолекулярной химии	8	28	36
4.2.	Процессы переноса и создание носителей		36	36
4.3.	Молекулярные и супрамолекулярные устройства	10	26	36

4.4.	Самопроцессы запрограммированные супрамолекулярные наноразмерные системы -	10	26	36
4.5.	Инженерия кристаллов. Биомиметика	8	28	36
ИТОГО		36	144	180

6. ФОРМЫ ТЕКУЩЕГО И ИТОГОВОГО КОНТРОЛЯ, КРИТЕРИИ ОЦЕНКИ

Текущий контроль освоения дисциплины проводится регулярно, начиная со второй недели обучения, в форме контроля посещаемости, устного опроса по изучаемой теме. Формой итогового контроля по дисциплине является зачет. Зачет проводится по вопросам.

Вопросы к итоговому контролю.

1. Понятие супрамолекулярная химия, химия «хозяин - гость».
2. Классификация супрамолекулярных соединений «хозяин - гость».
3. Хелатный и макроциклический эффекты.
4. Предорганизация и комплементарность.
5. Природа супрамолекулярных взаимодействий.
6. Супрамолекулярное конструирование хозяина.
7. Молекулярное распознавание, комплементарность.
8. Связывание и распознавание нейтральных молекул.
9. Координационная химия анионов и распознавание анионных субстратов.
10. Координационная химия ионов металлов и их распознавание.
11. Перенос катионов.
12. Перенос анионов.
13. Электрон-сопряженный перенос в окислительно-восстановительном градиенте.
14. Протон-сопряженный перенос в pH-градиенте.
15. Молекулярное распознавание, информация, сигналы.
16. Молекулярные и супрамолекулярные фотонные устройства.
17. Молекулярные и супрамолекулярные электронные устройства.
18. Супрамолекулярная электрохимия.
19. Молекулярные магнитные устройства.
20. Фотопереключающие устройства.
21. Электропереключающие устройства.
22. Супрамолекулярная самосборка с использованием координации ионов металлов. Координационные полимеры.
23. Самосборка за счет водородных связей.

Критерии оценки итогового контроля:

«зачтено»	Вопрос раскрыт, приведены конкретные примеры механизмов или соединений, методы доказательства их существования.
«не зачтено»	Вопрос не раскрыт или раскрыт частично, не хватает ключевых примеров и механизмов реакций, методов доказательства их осуществления

При отсутствии оценки «зачтено» обучающийся не допускается к промежуточной аттестации – кандидатскому экзамену по специальной дисциплине

7. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ**7.1. Литература**

- 1. Артюхов В.В. Общая теория систем: самоорганизация, устойчивость, разнообразие, кризисы : монография / В. В. Артюхов. - 3-е изд. - М. : Книжный дом "Либроком", 2012. - 224 с. : ил.**
- Баблюянец, Агнесса. Молекулы, динамика и жизнь. Введение в самоорганизацию материи [Текст] : [монография] / А. Баблюянец ; пер. с англ. канд. биол. наук Л. Н. Моисеевой. - М. : Мир, 1990. - 375 с.
- Биологическая неорганическая химия. Структура и реакционная способность : в 2 т. / И. Бертини [и др.] ; под ред. Н. Т. Кузнецова, Е. Р. Милаева, К. Ю. Жижилина ; пер. с англ. В. В. Авдеевой, Д. В. Севастьяновой. - М. : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2013.
- Введение в теорию межмолекулярных взаимодействий. – М.:Наука, 1982 . – 311 с.
- Волынский, А.Л. Структурная самоорганизация аморфных полимеров. - М.: Физматлит, 2005. – 232 с.**
- Воротынцев В.М. Наночастицы в двухфазных системах / В. М. Воротынцев. - [б. м.] : Известия, 2010. - 320 с.
- Зимон, Анатолий Давыдович. Коллоидная химия наночастиц : научное издание. - Москва : Научный мир, 2012. - 224 с. (2 экз.)**
- Каплан И.Г. Межмолекулярные взаимодействия. Физическая интерпретация, компьютерные расчеты и модельные потенциалы : переводное издание / И. Г. Каплан ; пер. с англ. Д. С. Безрукова, И. Г. Рябинкина ; под ред. Н. Ф. Степанова. - Москва : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2012. - 394 с. : ил.**
- Койфман, О.И. Синтетические рецепторы на основе порфиринов и их конъюгатов с каликс[4]аренами / М.: Наука, 2006. - 246 с. (2 экз.)

10. Коновалов, Александр Иванович. Супрамолекулярные системы - мост между неживой и живой материей [Текст] : научно-популярная литература. Вып. 26 / А. И. Коновалов. - М. : РБОФ "Знание" им. С.И. Вавилова, 2010. - 28 с.
11. Нанолечения. Концепции доставки лекарств в нанонауке / ред. А. Лампрехт, пер. с англ. О. В. Таратиной. - М. : Научный мир, 2010. - 232 с.
12. Рамбиди Н.Г. Структура и свойства наноразмерных образований. Реалии сегодняшней нанотехнологии : учеб. пособие / Н. Г. Рамбиди. - [б. м.] : Интеллект, 2011. - 376 с.
13. Рамбиди Н.Г. Физические и химические основы нанотехнологий / Н. Г. Рамбиди, А. В. Березкин. - [б. м.] : ФИЗМАТЛИТ, 2009. - 456 с.
14. Сергеев Г.Б. Нанохимия. – М.:Ун-т кн.дом, 2007. – 33 с.
15. Сесслер Дж.Л. Химия анионных рецепторов / Дж. Л. Сесслер, Ф. А. Гейл, Вон-Сеоб Хо; пер. с англ. С. В. Макарова, В. Б. Шейнина. - М. : URSS, 2011. - 456 с.
16. Скопенко, В.В. и др. Координационная химия: Учеб.пособие - М.: ИКЦ «Акадекнига», 2007. – 487 с.
17. Сид Дж. В., Этвуд Дж. Л., Супрамолекулярная химия. - т. 1,2. – Москва: Акадекнига, 2007. (2 экз.)
18. Химия комплексов “гость-хозяин”, под ред. Фегтле Ф. и Вебера Э., изд. Мир, М., 1988.

7.2. Электронные ресурсы

- ✓ Электронная платформа издательства American Chemical Society - <http://www.pubs.acs.org>
- ✓ Электронная платформа издательства Taylor&Francis - <http://www.informaworld.com>
- ✓ Электронная платформа издательства - [http:// www.scitation.aip.org](http://www.scitation.aip.org)
- ✓ Электронная платформа издательства Royal Society of Chemistry - <http://www.rsc.org>
- ✓ Электронная платформа издательства WILEY-BLACWALL - <http://www.interscience.wiley.com>
- ✓ Электронная платформа издательства SPRINGER - <http://www.springerlink.com>
- ✓ Платформа научной электронной библиотеки e-Library.ru - <http://www.elibrary.ru>
- ✓ Электронная платформа издательства Elsevier - <http://www.sciencedirect.com>
- ✓ Электронная платформа издательства Elsevier - <http://www.scopus.com> (Реферативно-поисковая база данных Scopus)

8. ОПИСАНИЕ МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЙ БАЗЫ, НЕОБХОДИМОЙ ДЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Лекционные занятия и консультации, самостоятельная работа по освоению дисциплины и подготовка к сдаче кандидатских экзаменов проводятся в специальных помещениях (читальный зал научной библиотеки и/или конференц-залы), оборудованных мебелью (столы, стулья), классной доской (меловой), компьютером, проектором для демонстрации презентаций.