

Федеральное государственное автономное образовательное
учреждение высшего образования
КАЗАНСКИЙ (ПРИВОЛЖСКИЙ) ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

«УТВЕРЖДАЮ»

Проректор

Проректор по научной деятельности

КФУ

Проф. Д.К. Гурталев

« _____ » _____ 20_____ г.



Программа дисциплины

Б1.В.ДВ.1.2 Супрамолекулярная неорганическая химия

Шифр по учебному плану, название

Направление подготовки: 04.06.01 – химические науки

Профиль подготовки: 02.00.08 – химия элементоорганических соединений

Квалификация выпускника: «Исследователь. Преподаватель-исследователь»

Форма обучения: очная

Язык обучения: русский

Казань 2015

1. КРАТКАЯ АННОТАЦИЯ

Программа дисциплины «Супрамолекулярная неорганическая химия» предназначена для аспирантов по специальности: 02.00.01 - неорганическая химия. В программе представлены основные положения, необходимые для формирования у аспирантов понятий о теоретических основах этой дисциплины, ее особенностях, связи с другими науками и ее практической значимости. Разобраны основные типы взаимодействий с участием неорганических веществ, относящиеся к супрамолекулярным: образование супермолекул и супрамолекулярных ансамблей. Охарактеризованы основные классы молекулярных рецепторов, особенности состояния дифильных веществ в растворах. Проанализированы функции молекулярного распознавания, транспорта и катализа с участием субъектов супрамолекулярной химии. Особое внимание уделено возможностям обнаружения супрамолекулярных взаимодействий в растворах дифильных соединений с использованием неорганических зондов (ЯМР, флуоресценция и др.). Показаны возможности разработки новых контрастных средств для медицинской диагностики, основанных на супрамолекулярных взаимодействиях с участием неорганических веществ.

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ) В СТРУКТУРЕ ОПОП

Дисциплина «Супрамолекулярная неорганическая химия» относится к дисциплинам по выбору (Б1.В.ДВ.1) вариативной части образовательной программы дисциплины «Неорганическая химия» послевузовского профессионального образования.

Осваивается на 2 курсе (4 семестр).

Для успешного освоения данной дисциплины нужно освоение в качестве предшествующих следующих дисциплин: «Неорганическая химия» (ионные равновесия в растворе, окислительно-восстановительные реакции, химия комплексных соединений), «Аналитическая химия» (инструментальные методы анализа), «Органическая химия» (химия макромолекул – потенциальных рецепторов и лигандов), «Физическая химия» (термодинамика и кинетика).

3. ПЕРЕЧЕНЬ ПЛАНИРУЕМЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ «Супрамолекулярная неорганическая химия».

Обучающийся, завершивший изучение дисциплины, должен

знать: основные принципы образования супермолекул и супрамолекулярных ансамблей на основе различных молекул и ионов, подходы к их конструированию и использованию в различных областях науки и техники.

уметь: применять теоретические знания о строении, составе и реакционной способности супрамолекулярных металлокомплексов для использования в конкретных практических приложениях.

владеть: навыками планирования исследований по созданию супрамолекулярных неорганических соединений для решения конкретных задач в областях теоретической и практической химии, медицины и фармакологии.

демонстрировать способность и готовность: применять результаты освоения дисциплины в профессиональной деятельности.

В результате освоения дисциплины формируются следующие компетенции:

Шифр компетенции	Расшифровка
------------------	-------------

	приобретаемой компетенции
УК-1	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-2	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-3	готовность участвовать в работе российских и международных исследовательских коллективов по решению научных и научно-образовательных задач
ОПК-1	способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий
ПК-1	умение применять основные законы химии при обсуждении полученных результатов, в том числе с привлечением информационных баз данных

4. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

4.1. Распределение трудоёмкости дисциплины (в часах) по видам нагрузки обучающегося и по разделам дисциплины

Общая трудоёмкость дисциплины составляет 3 зачетные единицы, 108 часов.

Форма промежуточной аттестации по дисциплине: зачет в 4 семестре.

	Раздел дисциплины	Семестр	Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	Самостоятельная работа
1.	Тема: Введение в дисциплину "Супрамолекулярная неорганическая химия" (СНХ).	4	2	0		4
2.	Тема: Особенности СНХ с участием неорганических соединений.	4	0	2		4
3.	Тема: Свойства растворов поверхностно-активных веществ и гидротропов.	4	0	2		4
4.	Тема: Особенности протекания реакций комплексообразования в растворах ПАВ.	4	2	0		4
5.	Тема: Задачи и возможности супрамолекулярной химии.	4	0	2		4
6.	Тема: Типы макромолекул, используемых в СНХ.	4	0	2		4
7.	Тема: Молекулярное распознавание.	4	2	0		4
8.	Тема: Распознавание катионов, анионов, нейтральных молекул.	4	2	0		4
9.	Тема: Факторы, определяющие состав и устойчивость макроциклических комплексов в растворе.	4	0	2		4
10.	Тема: Мембранный транспорт супермолекул.	4	2	0		4
11	Тема: Супрамолекулярный катализ.	4	2	0		4
12	Тема: Природные рецепторы.	4	2	0		4
13	Тема: Циклодекстрины.	4	0	2		4

14	Тема: Метациклофаны и их координационные возможности.	4	0	2		4
15	Тема: Применение метода ЯМ-релаксации в СНХ.	4	2	0		4
16	Тема: Контрастные агенты в МР-томографии.	4	0	2		4
17	Тема: Контрастные МРТ-агенты на основе самоорганизующихся систем.	4	2	0		4
18	Тема: Контрастные МРТ-агенты на основе наночастиц.	4	0	2		4
	Всего:		18	18		72

4.2 Содержание дисциплины

Тема 1.

Введение в дисциплину "Супрамолекулярная неорганическая химия" (СНХ). Исторические аспекты, связь СНХ с другими науками. Понятия и язык супрамолекулярной химии. Связь супрамолекулярной химии с другими областями науки: физикой, химией, биологией, материаловедением. Супермолекулы и полимолекулярные ансамбли. Основные функции супрамолекулярных образований (распознавание, перенос, превращение). История развития химии макроциклических соединений. Открытие краун-соединений, криптанов, метациклофанов.

Тема 2.

Особенности СНХ с участием неорганических соединений. Дифильные молекулы: особенности строения молекул, кристаллической структуры, растворов в воде и органических растворителях. Поверхностно-активные вещества: классификация (коллоидные, неколлоидные), типы (анионные, катионные, неионные, цвиттерионные, высокомолекулярные). Гидротропы. Свойства растворов поверхностно-активных веществ и гидротропов. Мицеллообразование и ассоциация, критические концентрации мицеллообразования (ККМ), агрегации (ККА). Типы образующихся агрегатов: малые агрегаты, прямые мицеллы (сферические, стержнеобразные), гексагональные фазы, обратные мицеллы, микроэмульсии, эмульсии. Природные ПАВ. Липиды. Липосомы. Клеточные мембраны.

Тема 3.

Свойства растворов поверхностно-активных веществ и гидротропов. Связывание мицеллами ионов и молекул, влияние типа и концентрации ПАВ, размера, природы и заряда противоионов, добавок солей, состава растворителя. Солюбилизация: движущие силы, влияние природы и концентрации солюбилизата, содержания добавок, свойств растворителя.

Тема 4.

Особенности протекания реакций комплексообразования в растворах ПАВ. Влияние ПАВ на равновесия комплексообразования в зависимости от заряда мицелл, ионности лиганда и его дифильных свойств. Особенности протекания реакций комплексообразования с участием гидрофильных лигандов в растворах неионных ПАВ. Возможности метода ЯМ-релаксации при изучении явлений ассоциации с участием мицелл как наноразмерных объектов. Особенности релаксации протонов в растворах парамагнитных металлокомплексов на основе соединений гадолиния(III) и марганца(II).

Тема 5.

Задачи и возможности супрамолекулярной химии. Молекулярное распознавание как направленное связывание. Комплексообразование типа "гость-хозяин" ("рецептор-субстрат"), основные понятия и признаки. Комплексы макроциклических соединений с ионами металлов и молекулярными катионами как разновидность комплексов "гость-хозяин". Природа

взаимодействия донорных атомов макроциклических лигандов с ионами металлов и азотсодержащими катионами. Виды распознавания: сферическое, тетраэдрическое, линейное. Распознавание катионов, анионов, нейтральных молекул. Особенности кристаллической структуры комплексов для разных видов рецепторов и субстратов.

Тема 6.

Типы макромолекул, используемых в СНХ. Применение подандов, краун-соединений, криптанов, сферандов, кавитандов, каликсаренов и циклодекстринов. Неорганический синтез. Разделение ионов металлов. Разделение изотопов. Применение в аналитической химии. Перенос ионов. Мембраны с избирательной проницаемостью. Химические сенсоры. Переключающие устройства. Химионика. Неорганические двойные спирали; репликация.

Тема 7.

Молекулярное распознавание. Комплексообразование типа "гость-хозяин". Влияние трехмерной структурной организации на эффективность и селективность координации ионов металлов на примере комплексообразования с подандами, краун-эфирами, криптандами, сферандами. Влияние гидрофобной полости, фенольных гидроксигрупп и конформации хозяина на комплексообразование каликсаренов, каликсрезорцинаренов, кукурбитурилов и циклодекстринов с ионами металлов и молекулярными катионами. Принцип двойной комплементарности.

Тема 8.

Распознавание катионов, анионов, нейтральных молекул. Концепция оптимального пространственного соответствия гостя и хозяина. Контроль над селективностью комплексообразования макроциклов с ионами металлов: диаметр, заряд, природа катиона; наличие, число и размер колец, жесткость структуры, наличие функциональных концевых групп. Особенности строения молекул-рецепторов для распознавания целевых катионов и анионов. Возможности распознавания нейтральных молекул (водородные связи, конформационные ограничения).

Тема 9.

Факторы, определяющие состав и устойчивость макроциклических комплексов в растворе: число и природа донорных атомов лиганда его конформация, эффекты сольватации и десольватации. Макроциклический эффект. Факторы, определяющие селективность комплексообразования при отсутствии геометрической комплементарности рецептора и субстрата. Природа и роль вклада СН-π взаимодействий субстрата с ароматической системой рецептора в устойчивость комплекса.

Тема 10.

Мембранный транспорт супермолекул. Применение мембранных технологий для разделения ионов, изотопов. Транспорт супермолекул. Особенности комплексообразования макроциклов с ионами металлов на границе раздела фаз вода-органический растворитель (мембрана) в процессах экстракции и переноса. Мембранный транспорт. Параметры, определяющие транспортные свойства лиганда. Перенос посредством носителей и через трансмембранные каналы. Механизм транспорта (унипорт, симпорт, антипорт). Сопряженный перенос (катион-электрон, катион-протон, фотосопряженный процесс).

Тема 11.

Супрамолекулярный катализ. Комплексы металлов как супрамолекулярные катализаторы. Металлоферменты. Супрамолекулярный катализ реакций разложения и синтеза. Особенности процессов с участием фосфатных групп и азотсодержащих рецепторов. Моделирование деятельности ферментов (биомолекулярный и абиотический катализ). Роль ионов металлов в супрамолекулярном катализе посредством образования смешаннолигандных соединений с компонентами реакции.

Тема 12.

Природные рецепторы. Антибиотики как ионофоры катионов металлов. Природные рецепторы. Ионофоры (валиномицин, боверин, энниатин, лазалоцид А, грамицидины). Особенности строения и образования комплексов с катионами щелочных и щелочноземельных

металлов. Валиномицин, структура молекулярной цепи, роль внутримолекулярных водородных связей в формировании структуры, конформации в растворителях разной природы.

Тема 13.

Циклодекстрины: образование комплексов включения, применение в медицине. Циклодекстрины - особенности строения природных циклодекстринов, возможности и роль функционализации по верхнему и нижнему ободу. Движущие силы взаимодействия циклодекстринов с субстратами. Применение циклодекстринов в медицине для адресной доставки лекарственных препаратов.

Тема 14.

Метациклофаны (каликсарены, тиакаликсарены, каликсрезорцинарены) и их координационные возможности. Применение солей в темплатном синтезе метациклофанов. Координационные возможности метациклофанов (гидроксильные группы на верхнем и нижнем ободах, ароматическая полость). Роль размера полости при росте числа олигомерных звеньев. Функционализация метациклофанов по нижнему и верхнему ободам. Водорастворимые метациклофаны. Возможности агрегирования дифильных метациклофанов в воде, образование смешанных агрегатов с мицеллами ПАВ.

Тема 15.

Возможности метода ЯМ-релаксации при изучении явлений ассоциации с участием мицелл как наноразмерных объектов. Роль природы корреляционных времен на способность парамагнитного зонда давать отклик на изменение размера анализируемого объекта. Особенности релаксации протонов в растворах парамагнитных металлокомплексов на основе соединений гадолиния(III) и марганца(II). Проявление в ЯМ-релаксации связывания парамагнитных ионов с полимерными лигандами.

Тема 16.

Контрастные агенты (КА) в магнитно-резонансной томографии (МРТ). Комплексы гадолиния(III), марганца(II) и железа(III) как основа контрастирования МРТ-изображений. Коммерческие КА на основе линейных и циклических полиаминополикарбоксилатов и их производных (свойства, недостатки).

Тема 17.

Контрастные МРТ-агенты на основе самоорганизующихся систем. Самоорганизация и включение комплексов с дифильными лигандами в мицеллы и везикулы, липосомы как способ проявления эффектов контрастирования в МРТ. Возможности агрегированных металлокомплексов на основе метациклофанов в качестве КА для МРТ. Роль состава и строения заместителей на ободах макроцикла на агрегационное поведение и способность к связыванию ионов зондов.

Тема 18.

Контрастные МРТ-агенты на основе наночастиц. Два подхода к конструированию наночастиц для МРТ. Использование «пассивных» (диамагнитных) наночастиц в качестве основы для нанесения парамагнитных металлокомплексов. Магнитно-активные наночастицы как парамагнитные ЯМР-зонды. Роль «мягкой» (защитной) оболочки в размере магнитного «ядра» и его парамагнетизме. Наночастицы на основе оксидов металлов (железа, гадолиния, марганца). Возможности гидрофиллизации наночастиц оксидов железа, стабилизированных гидрофобными оболочками. Перспективы использования мультимодальных контрастных агентов на основе суперпарамагнитных наночастиц и парамагнитных металлокомплексов.

5. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

На лекциях:

- компьютерные презентации лекций.

На семинарах:

- круглый стол с привлечением ведущих специалистов в области синтеза и координационной химии метациклофанов по разделу 14 «Метациклофаны и их координационные возможности».

6. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЯ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ ОБУЧАЮЩИХСЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ (МОДУЛЮ)

Вопросы к практическим занятиям

Тема 1. Введение в дисциплину "Супрамолекулярная химия" (СХ). Исторические аспекты, связь СХ с другими науками.

домашнее задание, примерные вопросы:

Основные понятия супрамолекулярной химии, ее взаимосвязь с другими областями науки: физикой, химией, биологией, материаловедением, неорганической химией и другими науками.

Тема 2. Особенности СХ с участием неорганических соединений.

домашнее задание, примерные вопросы:

Особенности СХ с участием неорганических соединений. Процессы с участием дифильных соединений. Природа супрамолекулярных взаимодействий

Тема 3. Свойства растворов поверхностно-активных веществ и гидротропов.

домашнее задание, примерные вопросы:

Свойства растворов поверхностно-активных веществ и гидротропов. Поверхностно-активные вещества: классификация (коллоидные, неколлоидные), типы (анионные, катионные, неионные, цвиттерионные, высокомолекулярные). Гидротропы. Свойства растворов поверхностно-активных веществ и гидротропов.

Тема 4. Особенности протекания реакций комплексообразования в растворах ПАВ.

домашнее задание, примерные вопросы:

Особенности протекания реакций комплексообразования в растворах ПАВ. Связывание анионов и нейтральных молекул Водорастворимые метациклофаны. Возможности агрегирования дифильных метациклофанов в воде, образование смешанных агрегатов с мицеллами ПАВ.50. Природные ПАВ. Липиды. Липосомы. Клеточные мембраны. Связывание мицеллами ионов и молекул, влияние типа и концентрации ПАВ, размера, природы и заряда противоионов, добавок солей, состава растворителя.

Тема 5. Экспериментальные основы супрамолекулярной неорганической химии.

домашнее задание, примерные вопросы:

Экспериментальные основы супрамолекулярной неорганической химии. Транспортные функции рецепторов.

Тема 6. Типы макромолекул, используемых в СХ.

домашнее задание, примерные вопросы:

Супермолекулы и полимолекулярные ансамбли. Основные функции супрамолекулярных образований (распознавание, перенос, превращение). Типы макромолекул, используемых в СХ.

Тема 7. Молекулярное распознавание. Комплексообразование типа "гость-хозяин"

домашнее задание, примерные вопросы:

Молекулярные устройства. Молекулярное распознавание. Комплексообразование типа "гость-хозяин" ("рецептор-субстрат"), основные понятия и признаки. Концепция оптимального пространственного соответствия гостя и хозяина.

Тема 8. Распознавание катионов, анионов, нейтральных молекул.

домашнее задание, примерные вопросы:

Особенности строения молекул-рецепторов для распознавания целевых катионов и анионов. Возможности распознавания нейтральных молекул (водородные связи, конформационные ограничения).

Тема 9. Факторы, определяющие состав и устойчивость макроциклических комплексов в растворе

домашнее задание, примерные вопросы:

Факторы, определяющие состав и устойчивость макроциклических комплексов в растворе: число и природа донорных атомов лиганда его конформация, эффекты сольватации и десольватации. Макроциклический эффект.

Тема 10. Мембранный транспорт супермолекул. Применение мембранных технологий для разделения ионов, изотопов.

домашнее задание, примерные вопросы:

Мембранный транспорт супермолекул. Применение мембранных технологий для разделения ионов, изотопов. Особенности комплексообразования макроциклов с ионами металлов на границе раздела фаз вода-органический растворитель (мембрана) в процессах экстракции и переноса. Мембранный транспорт. Параметры, определяющие транспортные свойства лиганда. Перенос посредством носителей и через трансмембранные каналы.

Тема 11. Супрамолекулярный катализ. Комплексы металлов как супрамолекулярные катализаторы. Металлоферменты.

домашнее задание, примерные вопросы:

Супрамолекулярный катализ. Роль ионов металлов в супрамолекулярном катализе посредством образования смешаннолигандных соединений с компонентами реакции.

Тема 12. Природные рецепторы. Антибиотики как ионофоры катионов металлов.

домашнее задание, примерные вопросы:

Природные рецепторы. Антибиотики как ионофоры катионов металлов. Природные рецепторы. Ионофоры (валиномицин, боверицин, энниатин, лазалоцид А, грамицидины). Особенности строения и образования комплексов с катионами щелочных и щелочноземельных металлов.

Тема 13. Циклодекстрины: образование комплексов включения, применение в медицине.

домашнее задание, примерные вопросы:

Циклодекстрины: образование комплексов включения, применение в медицине. Циклодекстрины - особенности строения природных циклодекстринов, возможности и роль функционализации по верхнему и нижнему ободу.

Тема 14. Метациклофаны (каликсарены, тиакаликсарены, каликсрезорцинарены) и их координационные возможности.

круглый стол, примерные вопросы:

Метациклофаны (каликсарены, тиакаликсарены, каликсрезорцинарены) и их координационные возможности. Метациклофаны (каликсарены, тиакаликсарены, каликсрезорцинарены). Применение солей в темплатном синтезе метациклофанов. Координационные возможности метациклофанов (гидроксильные группы на верхнем и нижнем ободах, ароматическая полость).

Тема 15. Возможности метода ЯМ-релаксации при изучении явлений ассоциации с участием мицелл как наноразмерных объектов.

домашнее задание, примерные вопросы:

Ассоциация дифильных соединений по данным метода ЯМР Возможности метода ЯМ-релаксации при изучении явлений ассоциации с участием мицелл как наноразмерных объектов. Проявление в ЯМ-релаксации связывания парамагнитных ионов с полимерными лигандами.

Тема 16. Контрастные агенты в МР-томографии.

домашнее задание, примерные вопросы:

Контрастные агенты в МР-томографии на основе низкомолекулярных комплексов гадолия(III), железа(III), марганца(II). Коммерческие КА на основе линейных и циклических полиаминополикарбоксилатов и их производных (свойства, недостатки).

Тема 17. Контрастные МРТ-агенты на основе самоорганизующихся систем

домашнее задание, примерные вопросы:

Контрастные МРТ-агенты на основе самоорганизующихся систем Самоорганизация и включение комплексов с дифильными лигандами в мицеллы и везикулы, липосомы как способ проявления эффектов контрастирования в МРТ. Возможности применения агрегированных металлокомплексов в качестве КА для МРТ.

Тема 18. Контрастные МРТ-агенты на основе наночастиц

домашнее задание, примерные вопросы:

Контрастные МРТ-агенты на основе самоорганизующихся наночастиц. Перспективы использования мультимодальных контрастных агентов на основе суперпарамагнитных наночастиц и парамагнитных металлокомплексов.

Контрольная работа

1. Супермолекулы и полимолекулярные ансамбли.
2. Открытие краун-соединений, криптандов, метациклофанов.
3. Комплексообразование типа "гость-хозяин" ("рецептор-субстрат"), основные понятия и признаки.
4. Виды распознавания: сферическое, тетраэдрическое, линейное.
5. Экспериментальные основы супрамолекулярной неорганической химии.
6. Факторы, определяющие состав и устойчивость макроциклических комплексов в растворе: число и природа донорных атомов лиганда его конформация, эффекты сольватации и десольватации. Макроциклический эффект.
7. Влияние трехмерной структурной организации на эффективность и селективность
8. координации ионов металлов на примере комплексообразования с подандами, краун-эффирами, криптандами, сферандами.
9. Природа и роль вклада СН- π взаимодействий субстрата с ароматической системой рецептора в устойчивость комплекса.
10. Супрамолекулярный катализ реакций разложения и синтеза.
11. Транспорт супермолекул.
12. Перенос посредством носителей и через трансмембранные каналы.
13. Метациклофаны (каликсарены, тиакаликсарены, каликсрезорцинарены). Применение солей в темплатном синтезе метациклофанов.
14. Водорастворимые метациклофаны. Возможности агрегирования дифильных метациклофанов в воде, образование смешанных агрегатов с мицеллами ПАВ.
15. Валиномицин, структура молекулярной цепи, роль внутримолекулярных водородных связей в формировании структуры, конформации в растворителях разной природы.
16. Дифильные молекулы: особенности строения молекул, кристаллической структуры, растворов в воде и органических растворителях.
17. Мицеллообразование и ассоциация, критические концентрации мицеллообразования (ККМ), агрегации (ККА).
18. Связывание мицеллами ионов и молекул, влияние типа и концентрации ПАВ, размера, природы и заряда противоионов, добавок солей, состава растворителя.
19. Возможности метода ЯМ-релаксации при изучении явлений ассоциации с участием мицелл как наноразмерных объектов.
20. Коммерческие КА на основе линейных и циклических полиаминополикарбоксилатов и их производных (свойства, недостатки).
21. Возможности применения агрегированных металлокомплексов в качестве КА для МРТ.

7. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ

7.1. Регламент дисциплины

Оценка знаний по дисциплине «Супрамолекулярная неорганическая химия» включает сумму оценок из текущего контроля (50 баллов) и итогового контроля (50 баллов). Текущий контроль включает проверку усвоения знаний обучающихся на практических занятиях, подготовки домашних заданий и рефератов, контрольной работы. Итоговый контроль состоит в оценке полученных обучающимися знаний, умений и навыков в ходе зачета.

7.2. Оценочные средства текущего контроля

Текущий контроль оценивается с использованием следующих средств:

- опроса на практических занятиях (10 баллов);
- оценки реферата (20 баллов);
- оценки за контрольную работу (20 баллов).

Темы рефератов

Супрамолекулярная химия

(и ее связь с другими областями науки: физикой, химией, биологией, материаловедением. Супермолекулы и полимолекулярные ансамбли. Основные функции супрамолекулярных образований (распознавание, перенос, превращение)).

Типы супрамолекулярных рецепторов

(краун-эфир, поданды, криптанды, кавитанды, сферанды, циклодекстрины, природные ионофоры, калликсарены, тиакаликсарены, кукурбитурилы - особенности строения, возможности образования комплексов с различными ионами и молекулами. Применение их для неорганического синтеза, переноса ионов, разделения ионов металлов, разделения изотопов.)

Супрамолекулярные взаимодействия в растворах дифильных веществ (особенности строения дифильных молекул, их кристаллической структуры, растворов в воде и органических растворителях. Поверхностно-активные вещества: классификация (коллоидные, неколлоидные), типы (анионные, катионные, неионные, цвиттерионные, высокомолекулярные).)

Взаимодействие агрегатов ПАВ с другими веществами

(Связывание мицеллами ионов и молекул, влияние типа и концентрации ПАВ, размера, природы и заряда противоионов, добавок солей, состава растворителя. Солюбилизация: движущие силы, влияние природы и концентрации солюбилизата, содержания добавок, свойств растворителя.)

Молекулярное распознавание

(Молекулярное распознавание как направленное связывание. Комплексообразование типа "гость-хозяин" ("рецептор-субстрат"), основные понятия и признаки. Комплексы макроциклических соединений с ионами металлов и молекулярными катионами как разновидность комплексов "гость-хозяин". Макроциклический эффект. Виды распознавания: сферическое, тетраэдрическое, линейное).

Супрамолекулярный перенос

(Особенности комплексообразования макроциклов с ионами металлов на границе раздела фаз вода-органический растворитель (мембрана) в процессах экстракции и переноса. Мембранный транспорт. Параметры, определяющие транспортные свойства лиганда. Перенос посредством носителей и через трансмембранные каналы. Механизм транспорта (унипорт, симпорт, антипорт)).

Супрамолекулярный катализ

Супрамолекулярный катализ как моделирование природных ферментов. Особенности переходного состояния в каталитическом взаимодействии «субстрат-рецептор». Роль состава, строения и расположения функциональных заместителей при конструировании катализаторов на основе макроциклов. Особенности катализа рецепторами катионов и анионов. Сокатализ (катализ процессов синтеза).

ЯМР-релаксационное зондирование

Возможности метода ЯМР-релаксации при изучении реакций комплексообразования и явлений ассоциации с участием мицелл как наноразмерных объектов. Роль природы корреляционных времен на способность парамагнитного зонда давать отклик на изменение размера анализируемого объекта. Особенности релаксации протонов в растворах парамагнитных металлокомплексов на основе соединений гадолиния(III) и марганца(II).

Контрастные агенты для МР-томографии

(Коммерческие КА на основе линейных и циклических полиаминополикарбоксилатов и их производных (свойства, недостатки). Проявление в ЯМ-релаксации связывания парамагнитных ионов с полимерными лигандами. Самоорганизации и включение комплексов с дифильными лигандами в мицеллы и везикулы, липосомы как способ проявления эффектов контрастирования в МРТ. Возможности агрегированных металлокомплексов на основе метациклофанов в качестве КА для МРТ.)

7.3. Вопросы к зачету

1. Понятия и язык супрамолекулярной химии.
2. Связь супрамолекулярной химии с другими областями науки: физикой, химией, биологией, материаловедением.
3. Основные функции супрамолекулярных образований (распознавание, перенос, превращение).
4. История развития химии макроциклических соединений.
5. Задачи и возможности супрамолекулярной химии.
6. Молекулярное распознавание как направленное связывание.
7. Комплексы макроциклических соединений с ионами металлов и молекулярными катионами как разновидность комплексов "гость-хозяин".
8. Природа взаимодействия донорных атомов макроциклических лигандов с ионами металлов и азотсодержащими катионами.
9. Распознавание катионов, анионов, нейтральных молекул.
10. Особенности кристаллической структуры комплексов для разных видов рецепторов и субстратов.
11. Макроциклические соединения. Номенклатура и классификация.
12. Типы лигандов: краун-эфир, поданды, криптанды, кавитанды, сферанды,
13. циклодекстрины, природные ионофоры, каликсарены, тиакаликсарены, кукурбитурилы - особенности строения, возможности образования комплексов с различными ионами и
14. молекулами.
15. Концепция оптимального пространственного соответствия гостя и хозяина.
16. Контроль над селективностью комплексообразования макроциклов с ионами металлов: диаметр, заряд, природа катиона; наличие, число и размер колец, жесткость структуры, наличие функциональных концевых групп. Принцип двойной комплементарности.
17. Влияние гидрофобной полости, фенольных гидроксигрупп и конформации хозяина на комплексообразование каликсаренов, каликсрезорцинаренов, кукурбитурилов и циклодекстринов с ионами металлов и молекулярными катионами.
18. Факторы, определяющие селективность комплексообразования при отсутствии геометрической комплементарности рецептора и субстрата.
19. Применение подандов, краун-соединений, криптандов, сферандов, кавитандов, каликсаренов и циклодекстринов.
20. Неорганический синтез. Разделение ионов металлов. Разделение изотопов. Применение в аналитической химии. Перенос ионов. Мембраны с избирательной проницаемостью.
21. Моделирование деятельности ферментов (биомолекулярный и абиотический катализ).
22. Химические сенсоры. Переключающие устройства. Химионика. Неорганические двойные спирали; репликация.

23. Особенности комплексообразования макроциклов с ионами металлов на границе раздела фаз вода-органический растворитель (мембрана) в процессах экстракции и переноса.
24. Мембранный транспорт. Параметры, определяющие транспортные свойства лиганда.
25. Механизм транспорта (унипорт, симпорт, антипорт).
26. Сопряженный перенос (катион-электрон, катион-протон, фотосопряженный процесс).
27. Координационные возможности метациклофанов (гидроксильные группы на верхнем и нижнем ободах, ароматическая полость).
28. Роль размера полости при росте числа олигомерных звеньев. Функционализация метациклофанов по нижнему и верхнему ободам.
29. Природные рецепторы. Ионофоры (валиномицин, боверицин, энниатин, лазалоцид А, грамицидины).
30. Особенности строения и образования комплексов с катионами щелочных и щелочноземельных металлов.
31. Циклодекстрины - особенности строения природных циклодекстринов, возможности и роль функционализации по верхнему и нижнему ободу.
32. Движущие силы взаимодействия циклодекстринов с субстратами. Применение циклодекстринов в медицине для адресной доставки лекарственных препаратов.
33. Поверхностно-активные вещества: классификация (коллоидные, неколлоидные), типы (анионные, катионные, неионные, цвиттерионные, высокомолекулярные).
34. Гидротропы. Свойства растворов поверхностно-активных веществ и гидротропов.
35. Типы образующихся агрегатов: малые агрегаты, прямые мицеллы (сферические, стержнеобразные), гексагональные фазы, обратные мицеллы, микроэмульсии, эмульсии.
36. Природные ПАВ. Липиды. Липосомы. Клеточные мембраны.
37. Солюбилизация: движущие силы, влияние природы и концентрации солюбилизата, содержания добавок, свойств растворителя.
38. Особенности протекания реакций комплексообразования в растворах ПАВ.
39. Особенности релаксации протонов в растворах парамагнитных металлокомплексов на основе соединений гадолиния(III) и марганца(II).
40. Контрастные агенты (КА) в магнитно-резонансной томографии (МРТ).
41. Проявление в ЯМ-релаксации связывания парамагнитных ионов с полимерными лигандами.
42. Самоорганизации и включение комплексов с дифильными лигандами в мицеллы и везикулы, липосомы как способ проявления эффектов контрастирования в МРТ.

7.4. Таблица соответствия компетенций, критериев оценки их освоения и оценочных средств

Индекс компетенции	Расшифровка компетенции	Показатель формирования компетенции для данной дисциплины	Оценочное средство
УК-1	способность к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях	способен критически анализировать и оценивать современные научные достижения; способен генерировать новые идеи при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях супрамолекулярной неорганической химии	реферат, собеседование в ходе устного опроса (темы 1-5)
УК-2	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	способен проектировать и осуществлять комплексные исследования, в том числе междисциплинарные, в области супрамолекулярной неорганической химии на основе целостного системного научного мировоззрения с использованием знаний в области истории и философии науки	реферат, собеседование в ходе устного опроса (темы 6-12)
УК-3	готовность участвовать в работе российских и международных исследовательских коллективов по решению научных и научно-образовательных задач	способен участвовать в работе российских и международных исследовательских коллективов по решению научных и научно-образовательных задач в области супрамолекулярной неорганической химии	собеседование в ходе устного опроса (темы 13-18)
ОПК-1	способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий	способен самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в области супрамолекулярной неорганической химии с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий	реферат, круглый стол, собеседование в ходе устного опроса (темы 7-18)
ПК-1	умение применять основные законы химии при обсуждении полученных результатов, в том числе с привлечением информационных баз данных	способен применять основные законы химии при обсуждении полученных в области супрамолекулярной неорганической химии результатов, в том числе с привлечением информационных баз данных	реферат, контрольная работа, собеседование в ходе устного опроса (темы 1-18)

8. МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ДЛЯ ОБУЧАЮЩИХСЯ ПРИ ОСВОЕНИИ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Методические рекомендации по освоению лекционного материала, подготовке к лекциям

Лекция – систематическое, последовательное изложение преподавателем учебного материала. Лекция предшествует практическим занятиям, поэтому ее основной задачей является раскрытие содержания темы, разъяснение ее значения, выделение особенностей изучения. В ходе лекции устанавливается связь с предыдущей и последующей темами, а также с другими разделами химии, определяются направления самостоятельной работы студентов.

В конце лекции преподаватель ставит задачи для самостоятельной работы, дает методические рекомендации по изучению научной и справочной литературы, оптимальной организации самостоятельной работы, чтобы при наименьших затратах времени получить наиболее высокие результаты.

С целью успешного освоения лекционного материала по дисциплине «Супрамолекулярная неорганическая химия» рекомендуется осуществлять его конспектирование.

Механизм конспектирования лекции составляют:

- восприятие смыслового сегмента речи лектора с одновременным выделением значимой информации;
- выделение информации с ее параллельным свертыванием в смысловой сегмент;
- перенос смыслового сегмента в знаковую форму для записи посредством выделенных опорных слов;
- запись смыслового сегмента с одновременным восприятием следующей информации
- схематичное изображение структур молекул и способов взаимодействия компонентов реакций.

Курс «Супрамолекулярная неорганическая химия» состоит из нескольких основных органически связанных между собой крупных разделов. На лекциях данные вопросы освещаются в связке и логической последовательности. Рекомендуется особое внимание обращать внимание на проблемные моменты, на которых акцентирует внимание преподаватель. Именно на эти моменты будет обращено внимание при проведении практических занятий.

Методические рекомендации по подготовке к практическим занятиям

Практическое занятие – вид учебных занятий, при котором в результате предварительной работы над программным материалом преподавателя и студента, в обстановке активного общения решаются познавательные задачи. В основе подготовки к практическому занятию лежит самостоятельная работа студентов по планам, заранее выданным преподавателем, и работа с научной и справочной литературой. Практическое занятие по данной дисциплине в отличие от лекции предполагает коллективное обсуждение студентами наиболее важных проблем изучаемого курса. Это не пересказ лекции или текста закона, а осмысление изучаемой проблемы и представление на обсуждение своих мыслей по содержанию материала.

Задача практического занятия состоит не только в том, чтобы изучить какой-то вопрос или ряд вопросов по конкретной теме. На таком занятии студенты обучаются излагать свою точку зрения перед аудиторией, отстаивать ее в научном споре, логично, аргументировано опровергать оппонентов, связывать теорию с практикой.

Практические занятия направлены на развитие у студентов навыков самостоятельной работы над литературными источниками, материалами научной практики, коллективное обсуждение наиболее важных проблем изучаемого курса, решение практических задач и разбор конкретных научных ситуаций.

Подготовка к практическим занятиям включает в себя изучение рекомендованных учебников, публикаций в научных монографиях, журналах, материалов конференций и другой специальной литературы. При подготовке к ответу на теоретические вопросы необходимо уяснить содержание и значение основных понятий и категорий, используемых в

супрамолекулярной неорганической химии. Большую помощь при изучении курса может оказать знакомство с публикациями в химических журналах. Рекомендуется пользоваться возможностями интернет-ресурсов.

К ответам студентов на вопросы предъявляются следующие требования:

- четко сформулируйте проблему, которую необходимо раскрыть;
- проанализируйте существующие точки зрения, рассмотрите теоретические и практические аспекты;
- изложите свою точку зрения на рассматриваемый вопрос, аргументируйте ее, подкрепите соответствующим материалом, ссылками на литературные данные, точки зрения компетентных специалистов-ученых, известные Вам экспериментальные данные;
- сделайте выводы, которые вытекают из сказанного;
- запишите заключение, сделанное преподавателем в конце занятия.

Методические рекомендации по организации самостоятельной работы

Вся учебная деятельность студента – это различные виды, формы и уровни самостоятельной работы, поэтому она является ведущей формой обучения в вузе. Лекционно-семинарская система в вузе предполагает, что у студентов уже имеется определенный опыт учебно-познавательной деятельности, сформированы основные учебные навыки и, прежде всего, умение самостоятельно добывать знания, осуществлять самостоятельный поиск учебной информации, которая в дальнейшем становится объектом совместного обсуждения в ходе практических занятий.

Основные цели и задачи, которые должны быть достигнуты в ходе выполнения самостоятельной работы, следующие: углубление и закрепление знаний по дисциплине; содействие развитию у студента навыков работы с учебной, научной и справочной литературой, развитие навыков практического применения полученных знаний; формирование у студента навыков самостоятельного анализа научных проблем.

Самостоятельную работу по дисциплине следует начать сразу же после занятия. Для работы необходимо ознакомиться с учебным планом группы и установить, какое количество часов отведено в целом на изучение дисциплины, а также на самостоятельную работу. Далее следует ознакомиться с графиком организации самостоятельной работы студентов и строить свою самостоятельную работу в течение семестра в соответствии с данным графиком. В нем указаны: номер темы, тема, подлежащая изучению на данной неделе, виды самостоятельной работы, которые необходимо выполнить студенту в течение семестра, а также оптимальное количество часов, рекомендуемых на их выполнение.

При этом целесообразно начинать работу по любой теме дисциплины с изучения теоретической части. Далее, по темам, содержащим эмпирический материал, следует изучить и проанализировать экспериментальные данные. Теоретический и экспериментальный материал студенту необходимо изучать в течение семестра в соответствии с темами, указанными в графике. Кроме того, по экспериментальному материалу следует представлять результаты анализа в форме схем взаимодействий, реакций, процессов.

В целях более эффективной организации самостоятельной работы студентам следует ознакомиться с учебной, монографической, журнальной и справочной литературой, интернет-ресурсами, рекомендуемыми преподавателем, а также списком вопросов к зачету.

9. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

9.1. Основная литература

1. Стойков И.И., Евтюгин Г.А. Основы нанотехнологии и нанохимии: учебное пособие. Казань: Издательство Казанского (Приволжского) федерального университета. - 2010. - 237 с.
2. Мюллер, Ульрих. Структурная неорганическая химия / У. Мюллер; пер с англ. А. М. Самойлова, Е. С. Рембезы под ред. А. М. Ховива. - Долгопрудный: Издательский Дом "Интеллект", 2010. - 351 с.
3. Федотов М.А. Ядерный магнитный резонанс в неорганической и координационной химии. Растворы и жидкости. [Электронный ресурс]. - М.: Физматлит, 2010. - 384 с. Режим доступа: http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_cid=25&pl1_id=2151

9.2. Дополнительная литература

1. Сид, Джонатан В. Супрамолекулярная химия : в 2 т. / Дж. В. Сид, Дж. Л. Этвуд ; под ред. акад. РАН, проф. А.Ю. Цивадзе, д.х.н., проф. В.В. Арсланова, д.х.н., проф. А.Д. Гарновского ; пер. с англ. к.х.н. И.Г. Варшавской [и др.] .— Москва : Академкнига, 2007 .— ; 25 .— ISBN 978-5-94628-303-8 ((рус. общий)) , 400.Т. 1 .— 2007 .— 479 с.
2. Сид, Джонатан В. Супрамолекулярная химия : в 2 т. / Дж. В. Сид, Дж. Л. Этвуд ; под ред. акад. РАН, проф. А.Ю. Цивадзе, д.х.н., проф. В.В. Арсланова, д.х.н., проф. А.Д. Гарновского ; пер. с англ. к.х.н. И.Г. Варшавской [и др.] .— Москва : Академкнига, 2007 .— ; 25 .— ISBN 978-5-94628-303-8 ((рус. общий)) , 400.Т. 2 .— 2007 .— С. [1],486-895
3. Сесслер Дж.Л., Гейл Ф. А., Вон-Сеоб Хо. Химия анионных рецепторов / Пер. с англ. под ред. О.И. Койфмана. М.: Изд-во URSS. 2011. - 456 с.
4. Гельфман М.И., Юстратов В.П. Неорганическая химия. [Электронный ресурс] – 2-е изд. - СПб: Лань, 2009. – 528 с. Режим доступа: http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_cid=25&pl1_id=4032
5. Амиров Р.Р. Соединения металлов как магнитно-релаксационные зонды для высокоорганизованных сред. Применение в МР-томографии и химии растворов. - Казань: "Новое знание", 2005. - 316 с.
6. Гусев А.И. Наноматериалы, наноструктуры, нанотехнологии. [Электронный ресурс] - 2-е изд., испр. - М.: Физматлит, 2009. - 416 с./ Режим доступа: http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=2173/
7. Стойков И.И. Молекулярное распознавание органических соединений. Часть 1. Казань: Казанский госуниверситет, 2009.- 97с.

9.3. Интернет-ресурсы:

<http://lib.nsu.ru:8080/xmlui/handle/nsu/619>
<http://www.cchem.berkeley.edu/knrgrp/sup.html>
<http://www.dur.ac.uk/jon.steed/projects.htm>
<http://suprachem.photonics.ru>,
<http://www.chem.asu.ru/org/supramol/programm.html>
<http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/anie.198800891/pdf>
<http://www.chem.gla.ac.uk/~bob/peacock.html>
http://www.chemistrydaily.com/chemistry/Supramolecular_chemistry
<http://www.chem.ufl.edu/~kschanze/outreach/h2.pdf>
<http://www-ics.u-strasbg.fr/spip.php?rubrique49&lang=en>
<http://www.freebookcentre.net/Chemistry/SupraMolecular-Chemistry-Books.html>

10. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ И ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

1. Мультимедийная аудитория, вместимостью более 60 человек. Мультимедийная аудитория состоит из интегрированных инженерных систем с единой системой управления, оснащенная современными средствами воспроизведения и визуализации любой видео и аудио информации, получения и передачи электронных документов. Типовая комплектация мультимедийной аудитории состоит из: мультимедийного проектора, автоматизированного проекционного экрана, акустической системы, а также интерактивной трибуны преподавателя, включающей монитор с диагональю не менее 19 дюймов, персональный компьютер (с техническими характеристиками не ниже Intel Core i3-2100, DDR3 4096Mb, 500Gb), конференц-микрофон, беспроводной микрофон, блок управления оборудованием, интерфейсы подключения: USB, audio, HDMI. Интерактивная трибуна преподавателя является ключевым элементом управления, объединяющим все устройства в единую систему, и служит полноценным рабочим местом преподавателя. Преподаватель имеет возможность легко управлять всей системой, не отходя от трибуны, что позволяет проводить лекции, практические занятия, презентации, вебинары, конференции и другие виды аудиторной нагрузки обучающихся в удобной и доступной для них форме с применением современных интерактивных средств обучения, в том числе с использованием в процессе обучения всех корпоративных ресурсов. Мультимедийная аудитория также оснащена широкополосным доступом в сеть интернет. Компьютерное оборудование имеет соответствующее лицензионное программное обеспечение.
2. Принтер и ксерокс для создания раздаточных материалов.
3. Материалы для проведения круглого стола.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО по направлению подготовки 04.06.01 Химические науки (уровень подготовки кадров высшей квалификации), утвержденного приказом МОиН РФ от 30 июля 2014 г. N 869.

Автор: профессор

Амиров Р.Р.

Рецензент: профессор

Улахович Н.А.

Программа одобрена на заседании учебно-методической комиссии Химического института протокол № 7 от 31 августа 2015 г.