

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
Федеральное государственное автономное учреждение  
высшего профессионального образования  
"Казанский (Приволжский) федеральный университет"  
Химический институт им. А.М. Бутлерова



**УТВЕРЖДАЮ**

Проректор  
по образовательной деятельности КФУ  
Проф. Таюрский Д.А.

"\_\_" \_\_\_\_\_ 20\_\_ г.

**Программа дисциплины**

Молекулярное распознавание органических соединений Б1.В.ДВ.6

Направление подготовки: 04.04.01 - Химия

Профиль подготовки: Химия супрамолекулярных нано- и биосистем

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

**Автор(ы):**

Стойков И.И.

**Рецензент(ы):**

Антипин И.С.

**СОГЛАСОВАНО:**

Заведующий(ая) кафедрой: Антипин И. С.

Протокол заседания кафедры No \_\_\_\_ от "\_\_\_\_" \_\_\_\_\_ 201\_\_ г

Учебно-методическая комиссия Химического института им. А.М. Бутлерова:

Протокол заседания УМК No \_\_\_\_ от "\_\_\_\_" \_\_\_\_\_ 201\_\_ г

Регистрационный No

Казань  
2015

## Содержание

1. Цели освоения дисциплины
2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы
3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля
4. Структура и содержание дисциплины/ модуля
5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения
6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов
7. Литература
8. Интернет-ресурсы
9. Материально-техническое обеспечение дисциплины/модуля согласно утвержденному учебному плану

Программу дисциплины разработал(а)(и) профессор, д.н. (профессор) Стойков И.И. Кафедра органической химии Химический институт им. А.М. Бутлерова, Ivan.Stoikov@mail.ru

### 1. Цели освоения дисциплины

Дисциплина "Молекулярное распознавание органических соединений" изучается магистрами 2 курса Химического Института А.М.Бутлерова Казанского федерального университета в течение 3-го семестра. Дисциплина "Молекулярное распознавание органических соединений" принадлежит к циклу ДС (программа подготовки специалистов) и осуществляет ознакомление с общей проблематикой супрамолекулярной химии в контексте новой области естествознания; знакомство с основными понятиями супрамолекулярной химии; овладение знаниями об особенностях супрамолекулярных систем; изучение теоретических основ дизайна рецепторов, супермолекул, супрамолекулярных ансамблей; ознакомление с основными типами молекулярного распознавания; освоение навыков и умений дизайна синтетических рецепторов. Дисциплина позволит студентам освоить современные знания в области супрамолекулярной химии. На основе системного подхода дать научные знания о предмете супрамолекулярной химии, сформировать понимание общих и наиболее важных закономерностей супрамолекулярных систем. Развить на этой основе простейшие навыки молекулярного дизайна синтетических рецепторов.

Полученные знания необходимы магистрам при подготовке, выполнении и защите курсовой и выпускной квалификационной работы, при решении научно-исследовательских, проектно-конструкторских, производственно-технологических задач в будущей профессиональной деятельности.

Усвоение теоретических знаний требует посещения лекций, самостоятельной работы с учебником и регулярно проверяется на контрольных точках рейтинговой системы и коллоквиумах.

Отдельные темы теоретического курса прорабатываются студентами самостоятельно в соответствии с планом самостоятельной работы и конкретными заданиями преподавателя с учетом индивидуальных особенностей магистров.

### 2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы высшего профессионального образования

Данная учебная дисциплина включена в раздел " Б1.В.ДВ.6 Дисциплины (модули)" основной образовательной программы 04.04.01 Химия и относится к дисциплинам по выбору. Осваивается на 1 курсе, 1 семестр.

Дисциплина "Молекулярное распознавание органических соединений" изучается на 1 курсе обучающимися по направлению 020100 "Химия", профилю "Химия супрамолекулярных нано- и биосистем". Форма обучения - очная.

### 3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля

В результате освоения дисциплины формируются следующие компетенции:

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ОК-3 (общекультурные компетенции)	готовностью к саморазвитию, самореализации, использованию творческого потенциала
ОПК-1 (профессиональные компетенции)	способностью использовать и развивать теоретические основы традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач
ПК-2 (профессиональные компетенции)	владением теорией и навыками практической работы в избранной области химии

В результате освоения дисциплины студент:

4. должен демонстрировать способность и готовность:  
применять полученные знания на практике

#### 4. Структура и содержание дисциплины/ модуля

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 зачетных(ые) единиц(ы) 72 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины зачет в 1 семестре.

Суммарно по дисциплине можно получить 100 баллов, из них текущая работа оценивается в 50 баллов, итоговая форма контроля - в 50 баллов. Минимальное количество для допуска к зачету 28 баллов.

86 баллов и более - "отлично" (отл.);

71-85 баллов - "хорошо" (хор.);

55-70 баллов - "удовлетворительно" (удов.);

54 балла и менее - "неудовлетворительно" (неуд.).

#### 4.1 Структура и содержание аудиторной работы по дисциплине/ модулю

##### Тематический план дисциплины/модуля

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
1.	Тема 1. Молекулярное распознавание	1	1	2	0	0	
2.	Тема 2. Краун-эфиры и их комплексы с катионами	1	2-3	2	2	0	
3.	Тема 3. Криптанدى и их комплексы с катионами	1	4-5	2	2	0	устный опрос
4.	Тема 4. Сферанды. Принцип ?предорганизации	1	6-7	2	2	0	
5.	Тема 5. Кавитанды и карцеранды	1	8-10	2	4	0	
6.	Тема 6. Комплексы типа ?гость-хозяин? с анионами	1	11-12	0	4	0	устный опрос
7.	Тема 7. Комплексы с нейтральными молекулами	1	13-14	0	4	0	
	Тема . Итоговая форма контроля	1		0	0	0	зачет
	Итого			10	18	0	

#### 4.2 Содержание дисциплины

##### Тема 1. Молекулярное распознавание

**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Распознавание, информация и комплементарность. Молекулярное распознавание и селективность взаимодействия. Два уровня соответствия субстрата рецептору: геометрия и электронное строение частиц. Самоорганизация макромолекул. Устойчивость и селективность связывания. Принцип двойной комплементарности. Нековалентные межмолекулярные взаимодействия. Биологическое молекулярное распознавание. Хранение и считывание информации на супрамолекулярном уровне. Супрамолекулярная химия программируемых супрамолекулярных систем. Принципы дизайна молекулярных рецепторов. Процессы обмена и регулирования. Принцип предорганизации.

## **Тема 2. Краун-эфиры и их комплексы с катионами**

### **лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Получение Ч.Педерсоном первых краун-эфиров и их комплексов с катионами. Номенклатура краун-эфиров. Коронанты. Кристаллические комплексы краун-эфиров с катионами щелочных металлов. Соответствие диаметров катиона металла и полости краун-эфира. Классификация типов комплексов ?гость-хозяин? по Краму. Комплексы типа ?насед? (perching complex). Комплексы типа ?гнездо? (resting complex). Капсульные комплексы (capsular complex). Устойчивость комплексов в растворах. Концепция переменного донорного центра (принцип Пирсона). Податы. Селективность связывания катионов металлов и устойчивость комплексов.

### **практическое занятие (2 часа(ов)):**

Получение Ч.Педерсоном первых краун-эфиров и их комплексов с катионами. Номенклатура краун-эфиров. Коронанты. Кристаллические комплексы краун-эфиров с катионами щелочных металлов. Соответствие диаметров катиона металла и полости краун-эфира. Классификация типов комплексов ?гость-хозяин? по Краму. Комплексы типа ?насед? (perching complex). Комплексы типа ?гнездо? (resting complex). Капсульные комплексы (capsular complex). Устойчивость комплексов в растворах. Концепция переменного донорного центра (принцип Пирсона). Податы. Селективность связывания катионов металлов и устойчивость комплексов.

## **Тема 3. Криптанты и их комплексы с катионами**

### **лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Создание Ж.-М.Леном сферических аналогов краун-эфиров. Криптанты ? трехмерные аминопольэфиры. Номенклатура криптантов. Форма криптантов: сферическая, эллипсоидная и цилиндрическая. Криптанты. Комплексы криптантов с катионами щелочных и щелочноземельных металлов. Устойчивость комплексов и соответствие диаметров катиона металла и полости криптанта. Селективность связывания катионов. Стереизомерные формы криптантов: ?экзо-экзо?, ?эндо-экзо? и ?эндо-эндо?. Эксклюзивные и инклюзивные комплексы.

### **практическое занятие (2 часа(ов)):**

Создание Ж.-М.Леном сферических аналогов краун-эфиров. Криптанты ? трехмерные аминопольэфиры. Номенклатура криптантов. Форма криптантов: сферическая, эллипсоидная и цилиндрическая. Криптанты. Комплексы криптантов с катионами щелочных и щелочноземельных металлов. Устойчивость комплексов и соответствие диаметров катиона металла и полости криптанта. Селективность связывания катионов. Стереизомерные формы криптантов: ?экзо-экзо?, ?эндо-экзо? и ?эндо-эндо?. Эксклюзивные и инклюзивные комплексы.

## **Тема 4. Сферанды. Принцип ?предорганизации**

### **лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Сравнение структур свободных и связанных в комплекс ?хозяев?: коронандов и криптантов. Реорганизация структуры ?хозяина? под структуру ?гостя? при комплексообразовании. Типы реорганизации рецепторов. Заполненная полость ?хозяина?. ?Челюсти? или шарнирная реорганизация. От внутримолекулярной к межмолекулярной реорганизации. Принцип ?предорганизации? Д.Крама. Гемисферанд ? частично организованный ?хозяин? для комплексообразования. Предельный случай предорганизации ?хозяина? к комплексообразованию с ?гостем?. Сферанд-прототип ? жестко организованный рецептор. Сфераты. Устойчивость комплексов и высокая селективность связывания катионов металлов.

### **практическое занятие (2 часа(ов)):**

Сравнение структур свободных и связанных в комплекс ?хозяев?: коронандов и криптандов. Реорганизация структуры ?хозяина? под структуру ?гостя? при комплексообразовании. Типы реорганизации рецепторов. Заполненная полость ?хозяина?. ?Челюсти? или шарнирная реорганизация. От внутримолекулярной к межмолекулярной реорганизации. Принцип ?предорганизации? Д.Крама. Гемисферанд ? частично организованный ?хозяин? для комплексообразования. Предельный случай предорганизации ?хозяина? к комплексообразованию с ?гостем?. Сферанд-прототип ? жестко организованный рецептор. Сфераты. Устойчивость комплексов и высокая селективность связывания катионов металлов.

### **Тема 5. Кавитанды и карцеранды**

#### **лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Соединения, содержащие молекулярные полости. Кавитанды ? синтетические молекулярные сосуды. Мета-циклофаны. Каликсарены и каликсрезорцинарены: номенклатура, получение, конформационная подвижность, образование комплексов. Кристаллические комплексы кавитандов. Комплексообразование в растворах. Карцеранды ? синтетические молекулярные клетки. Изучение свойств циклобутадиена. Перспективы применения карцерандов.

#### **практическое занятие (4 часа(ов)):**

Соединения, содержащие молекулярные полости. Кавитанды ? синтетические молекулярные сосуды. Мета-циклофаны. Каликсарены и каликсрезорцинарены: номенклатура, получение, конформационная подвижность, образование комплексов. Кристаллические комплексы кавитандов. Комплексообразование в растворах. Карцеранды ? синтетические молекулярные клетки. Изучение свойств циклобутадиена. Перспективы применения карцерандов.

### **Тема 6. Комплексы типа ?гость-хозяин? с анионами**

#### **практическое занятие (4 часа(ов)):**

Координационная химия анионов. ?Хозяева? для анионных ?гостей?. Протонированные циклические полиамины. ?Футбольный мяч?. Молекулы-клетки. Криптанды. Соли гуанидиния. Комплексообразование типа: ?лиганд ? центральный катион металла - гость?. ?Каскадное комплексообразование?. Металлоцены. Рецепторы анионов на основе фрагментов мочевины и тиомочевины.

### **Тема 7. Комплексы с нейтральными молекулами**

#### **практическое занятие (4 часа(ов)):**

Нейтральные ?гости?, содержащие N-H и O-H группы. Нейтральные субстраты с полярными C-H связями. ?Многорукие? поданды. Молекулы-?осьминоги?. Рецепторы с липофильными полостями. Пара-циклофаны. Комплексы внедрения и стэкинг-комплексы в кристаллическом состоянии и в растворах. Комплексы каликсаренов с нейтральными молекулами. Влияние трет-бутильной группы в пара-положении каликсаренов на комплексообразование. Циклодекстрины. Суперкомплексы  $\beta$ -циклодекстринов.

## **4.3 Структура и содержание самостоятельной работы дисциплины (модуля)**

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
3.	Тема 3. Криптанды и их комплексы с катионами	1	4-5	подготовка к устному опросу	22	устный опрос
6.	Тема 6. Комплексы типа ?гость-хозяин? с анионами	1	11-12	подготовка к устному опросу	22	устный опрос
	Итого				44	

## **5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения**

- компьютерные презентации лекций;

## **6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов**

### **Тема 1. Молекулярное распознавание**

### **Тема 2. Краун-эфиры и их комплексы с катионами**

### **Тема 3. Криптанты и их комплексы с катионами**

устный опрос , примерные вопросы:

### **Тема 4. Сферанды. Принцип ?предорганизации**

### **Тема 5. Кавитанды и карцеранды**

### **Тема 6. Комплексы типа ?гость-хозяин? с анионами**

устный опрос , примерные вопросы:

### **Тема 7. Комплексы с нейтральными молекулами**

### **Тема . Итоговая форма контроля**

Примерные вопросы к зачету:

По теме "Молекулярное распознавание"

1. Объясните термин "супермолекула".
2. Что включает в себя понятие "супрамолекулярной химии"?
3. Что такое супрамолекулярный ансамбль?
4. За счет каких взаимодействий образуются супрамолекулярные частицы?
5. Какие названия носят составные части супрамолекулярных ассоциатов?
6. Что такое топичность рецептора?
7. Чему равен порядок цикличности?
8. Какой может быть размерность структуры супрамолекулы?
9. Дайте определение понятию "хозяин", предложенному Д.Крамом.
10. Чем определяется селективность и эффективность связывания субстрата рецептором?
11. Что такое политопный соресцептор?
12. Перечислите известные вам самопроцессы.
13. Дайте определение понятиям аллостерия, кооперативность и саморепликация.

По теме "Краун-эфиры и их комплексы с катионами"

1. В чем заключается концепция координации?
2. Поясните принцип "ключ ? замок".
3. Чем молекулярное распознавание отличается от простого связывания?
4. Чем определяется выбор субстрата при молекулярном распознавании?
5. Какие параметры применяют для характеристики центров связывания?
6. Чем характеризуется оболочка лиганда?
7. В чем заключается принцип двойной комплементарности?
8. Соблюдение каких условий необходимо для распознавания рецептором субстрата?
9. Что включает в себя понятие "молекулярной информации"?
10. Что представляют собой молекулярные рецепторы?
11. В чем заключается дизайн молекулярных рецепторов?
12. Что такое эндорецептор?
13. Что означает понятие "конформационная жесткость рецептора"?
14. В чем отличие конформационно жестких рецепторов от конформационно гибких?
15. В чем заключается дизайн рецепторов макрополициклического типа?

16. В чем заключается принцип предорганизации?
17. Что такое макроциклический и криптатный эффекты?
18. Чем отличается монотопный рецептор от политопного?
19. Перечислите возможные макрополициклические структуры рецепторов?

По теме "Сферанды. Принцип "предорганизации"

1. Перечислите основные классы рецепторов, способных к распознаванию сферических субстратов.
2. Для распознавания каких субстратов применяют краун-эфиры?
3. От чего зависят селективность комплексообразования и устойчивость комплексов, образуемых краун-эфирами?
4. Какие краун-эфиры называют лариатными?
5. Как называются комплексы криптанов?
6. В чем заключается криптатный эффект?
7. От чего зависит селективность связывания катионов металлов криптандами?
8. В каких случаях наблюдается платообразная селективность связывания катионов металлов краун-эфирами?
9. В чем заключается электронная комплементарность при связывании катионов металлов криптандами?
10. В каких случаях образуются эндо-/экзоизомеры?
11. Какие макроциклы подходят для связывания переходных металлов?
12. Перечислите основные следствия образования комплексов рецепторов с катионами металлов.
13. Что представляют собой алкилиды и электриды?
14. Опишите строение частицы, называемой криптацием.
15. Как образование криптата влияет на химические свойства входящего в его состав иона?

По теме "Кавитанды и карцеранды"

1. Перечислите рецепторы с тетраэдрической полостью. Приведите примеры связываемых ионов.
2. В чем заключается эффект "положительной кооперативности"?
3. Объясните понятие "молекулярный хамелеон".
4. Приведите примеры рецепторов, связывающих первичные аммонийные катионы. За счет каких взаимодействий осуществляется связывание?
5. Какие рецепторы используются для связывания аммиакатов металлов?
6. Какими свойствами обладают супрамолекулярные частицы с координацией во второй сфере?
7. Что такое кавитанд?
8. Что представляет собой катион имидазолия?

По теме "Комплексы с нейтральными молекулами"

1. За счет каких взаимодействий происходит связывание и распознавание незаряженных молекул?
2. На какие группы подразделяются нейтральные субстраты?
3. Какие рецепторы связывают тиомочевину?
4. За счет каких взаимодействий рецепторы связывают нейтральные субстраты, содержащие C-H связи?
5. За счет каких взаимодействий рецепторы связывают нейтральные субстраты, содержащие N-H, O-H или D-H группы (где D - атом, донор НЭП)?

По теме "Комплексы типа "гость-хозяин" с анионами"



1. Какими отличительными особенностями обладают анионные субстраты по сравнению с соответствующими катионными субстратами?
2. Какую форму могут иметь анионные субстраты?
3. За счет каких взаимодействий происходит связывание анионных субстратов?
4. Наличие каких групп в рецепторе необходимо для связывания анионов?
5. Какие соединения применяются для связывания анионных субстратов?
6. Какими факторами определяется стабильность комплексов и селективность связывания анионных субстратов?
7. Какие рецепторы способны к сферическому связыванию анионных субстратов?
8. Какие рецепторы способны к сферическому распознаванию анионных субстратов?
9. Как зависит селективность образования и устойчивость анионных комплексов с участием полиаммонийных рецепторов от порядка цикличности?
10. Чем определяется стабильность и селективность образования комплексов?
11. Какие группы субстрата называют "якорными функциями"?
12. В каких случаях образуются комплексы второй координационной сферы, или суперкомплексы?
13. В чем заключается процесс каскадного комплексообразования анионов?

### 7.1. Основная литература:

Основы нанотехнологии и нанохимии, Стойков, Иван Иванович;Евтюгин, Геннадий Артурович, 2010г.

Нанотехнология, Суздаев, Игорь Петрович, 2013г.

3. Метод УФ-спектроскопии и его применение в органической и физической химии [Текст: электронный ресурс] : учебно-методическое пособие / Л. С. Якимова ; Казан. федер. ун-т, Хим. ин-т им. А. М. Бутлерова, Каф. орган. химии .? Электронные данные (1 файл: 0,67 Мб) .? (Казань : Казанский федеральный университет, 2015) .? Загл. с экрана .? Для 2-го семестра .? Вых. дан. ориг. печ. изд.: Казань, 2015 .? Режим доступа: только для студентов и сотрудников КФУ .? <URL:[http://libweb.kpfu.ru/ebooks/07-ICH/07\\_54\\_000903.pdf](http://libweb.kpfu.ru/ebooks/07-ICH/07_54_000903.pdf)>.

[ ] [ Детальная информация ]

### 7.2. Дополнительная литература:

Справочник Шпрингера по нанотехнологиям. Т. 3, , 2010г.

Справочник Шпрингера по нанотехнологиям. Т. 2, , 2010г.

Справочник Шпрингера по нанотехнологиям. Т. 1, , 2010г.

Молекулярное распознавание органических соединений. Ч. 1, , 2010г.

Молекулярное распознавание органических соединений, Стойков, Иван Иванович, 2009г.

Молекулярное распознавание паров органических соединений производными каликсаренов, Сафина, Гульназ Дамировна, 2012г.

7. Будников Г.К., Евтюгин Г.А., Майстренко В.Н. Модифицированные электроды для вольтамперометрии в химии, биологии и медицине / "Лаборатория знаний", 2013, 416.  
<http://e.lanbook.com/view/book/3159/>

### 7.3. Интернет-ресурсы:

[www.nanometer.ru](http://www.nanometer.ru) - [www.nanometer.ru](http://www.nanometer.ru)

[www.nanotech.ru](http://www.nanotech.ru) - [www.nanotech.ru](http://www.nanotech.ru)

Википедия - [https://ru.wikipedia.org/wiki/Молекулярное\\_распознавание](https://ru.wikipedia.org/wiki/Молекулярное_распознавание)

Лен - <http://www.twirpx.com/file/63581/>

Супрамолекулярная химия - [http://www.pereplet.ru/nauka/Soros/pdf/9709\\_032.pdf](http://www.pereplet.ru/nauka/Soros/pdf/9709_032.pdf)

## **8. Материально-техническое обеспечение дисциплины(модуля)**

Освоение дисциплины "Молекулярное распознавание органических соединений" предполагает использование следующего материально-технического обеспечения:

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 тач-скрин монитор с диагональю не менее 22 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.

мультимедийная аудитория

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО и учебным планом по направлению 04.04.01 "Химия" и магистерской программе Химия супрамолекулярных нано- и биосистем .

Автор(ы):

Стойков И.И. \_\_\_\_\_

"\_\_" \_\_\_\_\_ 201\_\_ г.

Рецензент(ы):

Антипин И.С. \_\_\_\_\_

"\_\_" \_\_\_\_\_ 201\_\_ г.