

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. Талюцкий Д.А.



_____ 20__ г.

подписано электронно-цифровой подписью

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 7136017

Казань
2017

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-эфир и их комплексы с катионами	1	2-3	2	2	0	
3.	Тема 3. Криптан и их комплексы с катионами	1	4-5	2	2	0	Контрольная работа
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	Контрольная работа
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 аминополиэфиры. 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 аминополиэфиры. 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 β -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 контрольной работе	22	контрольная работа
6.	Тема 6. Комплексы типа ?гость-хозяин? с анионами	1	11-12	подготовка к контрольной работе	22	контрольная работа
	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

контрольная работа , примерные вопросы:

Билет 1 1. Объясните термин ?супермолекула?. 2. Что включает в себя понятие ?супрамолекулярной химии?? Билет 2 1. Что такое супрамолекулярный ансамбль? 2. За счет каких взаимодействий образуются супрамолекулярные частицы? Билет 3 1. Какие названия носят составные части супрамолекулярных ассоциатов? 2. Что такое топичность рецептора? Билет 4 1. Чему равен порядок цикличности? 2. Какой может быть размерность структуры супермолекулы?

Тема 4. Сферанды. Принцип ?предорганизации

Тема 5. Кавитанды и карцеранды

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

контрольная работа , примерные вопросы:

Билет 1 1. Дайте определение понятию ?хозяин?, предложенному Д.Крамом. 2. Чем определяется селективность и эффективность связывания субстрата рецептором? 3. За счет каких взаимодействий происходит связывание анионных субстратов? Билет 2 1. Что такое политопный рецептор? 2. Перечислите известные вам самопроцессы. 3. Какими отличительными особенностями обладают анионные субстраты по сравнению с соответствующими катионными субстратами? Билет 3 1. Дайте определение понятиям аллостерия, кооперативность и саморепликация. 2. Какими факторами определяется стабильность комплексов и селективность связывания анионных субстратов? 3. В чем заключается процесс каскадного комплексообразования анионов?

Тема 7. Комплексы с нейтральными молекулами

Тема . Итоговая форма контроля

Примерные вопросы к зачету:

Примеры билетов

Билет ♦ 1 к зачету по дисциплине "Молекулярное распознавание органических соединений"

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. Какими свойствами обладают супрамолекулярные частицы с координацией во второй сфере?

Билет ♦ 2 к зачету по дисциплине "Молекулярное распознавание органических соединений"

1. Что такое кавитанд?
2. Что представляет собой катион имидазолия?
3. За счет каких взаимодействий происходит связывание и распознавание незаряженных молекул?
4. На какие группы подразделяются нейтральные субстраты?
5. Какие рецепторы связывают тиомочевину?

7.1. Основная литература:

Нанотехнология, Суздалев, Игорь Петрович, 2013г.

2. Старостин, В.В. Материалы и методы нанотехнологий. [Электронный ресурс] ? Электрон. дан. ? М. : Издательство 'Лаборатория знаний', 2015. ? 434 с. ? Режим доступа: <http://e.lanbook.com/book/66203> ? Загл. с экрана.

3. Дзидзигури, Э.Л. Процессы получения наночастиц и наноматериалов. Нанотехнологии. [Электронный ресурс] / Э.Л. Дзидзигури, Е.Н. Сидорова. ? Электрон. дан. ? М. : МИСИС, 2012. ? 71 с. ? Режим доступа: <http://e.lanbook.com/book/47445> ? Загл. с экрана.

4. Евтюгин, Геннадий Артурович. Электрохимические (био)сенсоры на основе супрамолекулярных структур .? Казань : [Издательство Казанского университета], 2016 .? 296 с. : ил. ; 26 .? Библиогр.: .? ISBN 978-5-00019-722-6

7.2. Дополнительная литература:

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

2. 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 .? .

3. Головин, Ю.И. Основы нанотехнологий. [Электронный ресурс] ? Электрон. дан. ? М. : Машиностроение, 2012. ? 656 с. ? Режим доступа: <http://e.lanbook.com/book/5793> ? Загл. с экрана.

4. Марголин, В.И. Введение в нанотехнологию. [Электронный ресурс] / В.И. Марголин, В.А. Жабрев, Г.Н. Лукьянов, В.А. Тупик. ? Электрон. дан. ? СПб. : Лань, 2012. ? 464 с. ? Режим доступа: <http://e.lanbook.com/book/4310> ? Загл. с экрана.

7.3. Интернет-ресурсы:

www.nanometer.ru - www.nanometer.ru

www.nanotech.ru - www.nanotech.ru

Википедия - 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

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.

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе Издательства "Лань", доступ к которой предоставлен студентам. ЭБС Издательства "Лань" включает в себя электронные версии книг издательства "Лань" и других ведущих издательств учебной литературы, а также электронные версии периодических изданий по естественным, техническим и гуманитарным наукам. ЭБС Издательства "Лань" обеспечивает доступ к научной, учебной литературе и научным периодическим изданиям по максимальному количеству профильных направлений с соблюдением всех авторских и смежных прав.

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.