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. Минзарипов Р.Г.
_____
"___"_____20___ г.

# Программа дисциплины

Супрамолекулярная неорганическая химия С3.ДВ.1

Специальность: 020201.65 - Фундаментальная и прикладная химия
Специализация: Неорганическая химия
Квалификация выпускника: специалист
Форма обучения: очное
Язык обучения: русский
**Автор(ы):**
Амиров Р.Р.
**Рецензент(ы):**
Чевела В.В.

**СОГЛАСОВАНО:**
Заведующий(ая) кафедрой: Амиров Р. Р.
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
2014


ЭЛЕКТРОННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНФОРМАЦИОННО-АНАЛИТИЧЕСКАЯ СИСТЕМА КФУ

## 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) заведующий кафедрой, д.н. (профессор) Амиров Р.Р.
Кафедра неорганической химии Химический институт им. А.М. Бутлерова ,
Rustem.Amirov@kpfu.ru

## 1. Цели освоения дисциплины

формирование у студентов понятий о теоретических основах этой дисциплины, ее особенностях, связи с другими науками и ее практической значимости. В результате освоения данной дисциплины должны быть сформированы представления об объектах супрамолекулярной химии, методах их исследования, закономерностях протекания процессов образования дискретных супермолекул и супрамолекулярных ансамблей, их структуре, свойствах и потенциальных областях применения.

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

Данная учебная дисциплина включена в раздел " С3.ДВ.1 Профессиональный" основной образовательной программы 020201.65 Фундаментальная и прикладная химия и относится к дисциплинам по выбору. Осваивается на 4 курсе, 8 семестр.

Дисциплина "Супрамолекулярная неорганическая химия" относится к вариативной части учебного цикла С3 "Профессиональные (специальные) дисциплины" профиля "Неорганическая химия" (курсы по выбору студентов). Она базируется на знаниях и умениях, выработанных при прохождении общих профессиональных курсов базовой части цикла С3 "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. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля

В результате освоения дисциплины формируются следующие компетенции:

| Шифр компетенции | Расшифровка приобретаемой компетенции |
|---|---|
| ПК-1 (профессиональные компетенции) | понимает сущность и социальную значимость профессии, основных перспектив и проблем, определяющих конкретную область деятельности |

В результате освоения дисциплины студент:

1. 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.

2. должен уметь:

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

3. должен владеть:

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

4. должен демонстрировать способность и готовность:

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

## 4. Структура и содержание дисциплины/ модуля

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

Форма промежуточного контроля дисциплины зачет в 8 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. Введение в дисциплину "Супрамолекулярная химия" (СХ). Исторические аспекты, связь СХ с другими науками. | 8 | 1 | 0 | 2 | 0 | домашнее задание |
| 2. | Тема 2. Особенности СХ с участием неорганических соединений. | 8 | 2 | 0 | 2 | 0 | домашнее задание |
| 3. | Тема 3. Свойства растворов поверхностно-активных веществ и гидротропов. | 8 | 3 | 0 | 2 | 0 | домашнее задание |
| 4. | Тема 4. Особенности протекания реакций комплексообразования в растворах ПАВ. | 8 | 4 | 0 | 2 | 0 | домашнее задание |
| 5. | Тема 5. Экспериментальные основы супрамолекулярной неорганической химии. | 8 | 5 | 0 | 2 | 0 | домашнее задание |
| 6. | Тема 6. Типы макромолекул, используемых в СХ. | 8 | 6 | 0 | 2 | 0 | домашнее задание |

| N | Раздел Дисциплины/ Модуля | Семестр | Неделя семестра | Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах) | | | Текущие формы контроля |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | | | | Лекции | Практические занятия | Лабораторные работы | |
| 7. | Тема 7. Молекулярное распознавание. Комплексообразование типа "гость-хозяин" | 8 | 7 | 0 | 2 | 0 | домашнее задание |
| 8. | Тема 8. Распознавание катионов, анионов, нейтральных молекул. | 8 | 8 | 0 | 2 | 0 | домашнее задание |
| 9. | Тема 9. Факторы, определяющие состав и устойчивость макроциклических комплексов в растворе | 8 | 9 | 0 | 2 | 0 | домашнее задание |
| 10. | Тема 10. Мембранный транспорт супермолекул. Применение мембранных технологий для разделения ионов, изотопов. | 8 | 10 | 0 | 2 | 0 | домашнее задание |
| 11. | Тема 11. Супрамолекулярный катализ. Комплексы металлов как супрамолекулярные катализаторы. Металлоферменты. (круглый стол ? case study) | 8 | 11 | 0 | 2 | 0 | домашнее задание |
| 12. | Тема 12. Природные рецепторы. Антибиотики как ионофоры катионов металлов. | 8 | 12 | 0 | 2 | 0 | домашнее задание |
| 13. | Тема 13. Циклодекстрины: образование комплексов включения, применение в медицине. | 8 | 13 | 0 | 2 | 0 | домашнее задание |
| 14. | Тема 14. Метациклофаны (каликсарены, тиакаликсарены, каликсрезорцинарены) и их координационные возможности. (круглый стол ? case study) | 8 | 14 | 0 | 2 | 0 | домашнее задание |


ЭЛЕКТРОННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНФОРМАЦИОННО-АНАЛИТИЧЕСКАЯ СИСТЕМА КФУ

| N | Раздел Дисциплины/ Модуля | Семестр | Неделя семестра | Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах) | | | Текущие формы контроля |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | | | | Лекции | Практические занятия | Лабораторные работы | |
| 15. | Тема 15. Возможности метода ЯМ-релаксации при изучении явлений ассоциации с участием мицелл как наноразмерных объектов. | 8 | 15 | 0 | 2 | 0 | домашнее задание |
| 16. | Тема 16. Контрастные агенты в МР-томографии. | 8 | 16 | 0 | 2 | 0 | домашнее задание |
| 17. | Тема 17. Контрастные МРТ-агенты на основе самоорганизующихся систем | 8 | 17 | 0 | 2 | 0 | домашнее задание |
| 18. | Тема 18. Контрастные МРТ-агенты на основе наночастиц | 8 | 18 | 0 | 2 | 0 | контрольная работа |
| . | Тема . Итоговая форма контроля | 8 | | 0 | 0 | 0 | зачет |
| | Итого | | | 0 | 36 | 0 | |

**4.2 Содержание дисциплины**

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

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

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, криптандов, метациклофанов.

**Тема 2. Особенности СХ с участием неорганических соединений.**

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

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.**

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

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. Особенности протекания реакций комплексообразования в растворах 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 4. Особенности протекания реакций комплексообразования в растворах ПАВ.**

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

Экспериментальные основы супрамолекулярной неорганической химии. Макроциклические соединения. Номенклатура и классификация. Типы лигандов: краун-эфиры, поданды, криптанды, кавитанды, сферанды, циклодекстрины, природные ионофоры, каликсарены, тиакаликсарены, кукурбитурилы - особенности строения, возможности образования комплексов с различными ионами и молекулами.

**Тема 5. Экспериментальные основы супрамолекулярной неорганической химии.**

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

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 СХ.**

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

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

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

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

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 8. Распознавание катионов, анионов, нейтральных молекул.**

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

Влияние трехмерной структурной организации на эффективность и селективность координации ионов металлов на примере комплексообразования с подандами, краун-эфирами, криптандами, сферандами. Влияние гидрофобной полости, фенольных гидрокси-групп и конформации хозяина на комплексообразование каликсаренов, каликсрезорцинаренов, кукурбитурилов и циклодекстринов с ионами металлов и молекулярными катионами. Факторы, определяющие селективность комплексообразования при отсутствии геометрической комплементарности рецептора и субстрата. Природа и роль вклада CH-□ взаимодействий субстрата с ароматической системой рецептора в устойчивость комплекса.

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

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

Применение подандов, краун-соединений, криптандов, сферандов, кавитандов, каликсаренов и циклодекстринов. Неорганический синтез. Разделение ионов металлов. Разделение изотопов. Применение в аналитической химии. Перенос ионов. Мембраны с избирательной проницаемостью. Супрамолекулярный катализ реакций разложения и синтеза. Моделирование деятельности ферментов (биомолекулярный и абиотический катализ). Химические сенсоры. Переключающие устройства. Химионика. Неорганические двойные спирали; репликация.

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

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

Природные рецепторы. Ионофоры (валиномицин, боверицин, 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. 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 11. Супрамолекулярный катализ. Комплексы металлов как супрамолекулярные катализаторы. Металлоферменты. (круглый стол ? case study)**

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

Метациклофаны (каликсарены, тиакаликсарены, каликсрезорцинарены). 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 12. Природные рецепторы. Антибиотики как ионофоры катионов металлов.**

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

Контрастные агенты (КА) в магнитно-резонансной томографии (МРТ). 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.

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

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

Циклодекстрины ? особенности строения природных циклодекстринов, возможности и роль их размера, функционализации по верхнему и нижнему ободу. Движущие силы взаимодействия циклодекстринов с субстратами. Особенности взаимодействия циклодекстринов с веществами, роль полярности полости и ободов. Применение циклодекстринов в медицине для адресной доставки лекарственных препаратов

**Тема 14. Метациклофаны (каликсарены, тиакаликсарены, каликсрезорцинарены) и их координационные возможности. (круглый стол ? case study)**

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

Циклодекстрины ? особенности строения природных циклодекстринов, возможности и роль их размера, функционализации по верхнему и нижнему ободу. Движущие силы взаимодействия циклодекстринов с субстратами. Особенности взаимодействия циклодекстринов с веществами, роль полярности полости и ободов. Применение циклодекстринов в медицине для адресной доставки лекарственных препаратов.


ЭЛЕКТРОННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНФОРМАЦИОННО-АНАЛИТИЧЕСКАЯ СИСТЕМА КФУ

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

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

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 в МР-томографии.**

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

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**

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

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 агрегационной поведение и способность к связыванию ионов зондов.

**Тема 18. Контрастные МРТ-агенты на основе наночастиц**

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

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 гидрофилизации наночастиц оксидов железа, стабилизированных гидрофобными оболочками.

### 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 |
|---|---|---|---|---|---|---|
| 1. | Тема 1. Введение в дисциплину "Супрамолекулярная химия" (СХ). Исторические аспекты, связь СХ с другими науками. | 8 | 1 | подготовка домашнего задания | 2 | домашнее задание |
| 2. | Тема 2. Особенности СХ с участием неорганических соединений. | 8 | 2 | подготовка домашнего задания | 2 | домашнее задание |
| 3. | Тема 3. Свойства растворов поверхностно-активных веществ и гидротропов. | 8 | 3 | подготовка домашнего задания | 2 | домашнее задание |

| N | Раздел Дисциплины | Семестр | Неделя семестра | Виды самостоятельной работы студентов | Трудоемкость (в часах) | Формы контроля самостоятельной работы |
|---|---|---|---|---|---|---|
| 4. | Тема 4. Особенности протекания реакций комплексообразования в растворах ПАВ. | 8 | 4 | подготовка домашнего задания | 2 | домашнее задание |
| 5. | Тема 5. Экспериментальные основы супрамолекулярной неорганической химии. | 8 | 5 | подготовка домашнего задания | 2 | домашнее задание |
| 6. | Тема 6. Типы макромолекул, используемых в СХ. | 8 | 6 | подготовка домашнего задания | 2 | домашнее задание |
| 7. | Тема 7. Молекулярное распознавание. Комплексообразование типа "гость-хозяин" | 8 | 7 | подготовка домашнего задания | 2 | домашнее задание |
| 8. | Тема 8. Распознавание катионов, анионов, нейтральных молекул. | 8 | 8 | подготовка домашнего задания | 2 | домашнее задание |
| 9. | Тема 9. Факторы, определяющие состав и устойчивость макроциклических комплексов в растворе | 8 | 9 | подготовка домашнего задания | 2 | домашнее задание |
| 10. | Тема 10. Мембранный транспорт супермолекул. Применение мембранных технологий для разделения ионов, изотопов. | 8 | 10 | подготовка домашнего задания | 2 | домашнее задание |
| 11. | Тема 11. Супрамолекулярный катализ. Комплексы металлов как супрамолекулярные катализаторы. Металлоферменты. (круглый стол ? case study) | 8 | 11 | подготовка домашнего задания | 2 | домашнее задание |
| 12. | Тема 12. Природные рецепторы. Антибиотики как ионофоры катионов металлов. | 8 | 12 | подготовка домашнего задания | 2 | домашнее задание |


ЭЛЕКТРОННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНФОРМАЦИОННО-АНАЛИТИЧЕСКАЯ СИСТЕМА КФУ

| N | Раздел Дисциплины | Семестр | Неделя семестра | Виды самостоятельной работы студентов | Трудоемкость (в часах) | Формы контроля самостоятельной работы |
|---|---|---|---|---|---|---|
| 13. | Тема 13. Циклодекстрины: образование комплексов включения, применение в медицине. | 8 | 13 | подготовка домашнего задания | 2 | домашнее задание |
| 14. | Тема 14. Метациклофаны (каликсарены, тиакаликсарены, каликсрезорцинарены) и их координационные возможности. (круглый стол ? case study) | 8 | 14 | подготовка домашнего задания | 2 | домашнее задание |
| 15. | Тема 15. Возможности метода ЯМ-релаксации при изучении явлений ассоциации с участием мицелл как наноразмерных объектов. | 8 | 15 | подготовка домашнего задания | 2 | домашнее задание |
| 16. | Тема 16. Контрастные агенты в МР-томографии. | 8 | 16 | подготовка домашнего задания | 2 | домашнее задание |
| 17. | Тема 17. Контрастные МРТ-агенты на основе самоорганизующихся систем | 8 | 17 | подготовка домашнего задания | 2 | домашнее задание |
| 18. | Тема 18. Контрастные МРТ-агенты на основе наночастиц | 8 | 18 | подготовка к контрольной работе | 2 | контрольная работа |
| | Итого | | | | 36 | |

## 5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения

компьютерные презентации лекций;

- круглый стол с привлечением ведущих специалистов в области исследования каталитической активности супрамолекулярных комплексов металлов по разделу 11 "Супрамолекулярный катализ"

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

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

### 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:

Распознавание катионов, анионов, нейтральных молекул.

**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. (круглый стол ? case study)**

домашнее задание , примерные вопросы:

Супрамолекулярный катализ. Комплексы металлов как супрамолекулярные катализаторы. Металлоферменты. (круглый стол ? case study)

**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 ? case study)**

домашнее задание , примерные вопросы:

Метациклофаны (каликсарены, тиакаликсарены, каликсрезорцинарены) и их координационные возможности. (круглый стол ? case study) 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.

**Тема 17. Контрастные МРТ-агенты на основе самоорганизующихся систем**

домашнее задание , примерные вопросы:

Контрастные МРТ-агенты на основе самоорганизующихся систем Коммерческие КА на основе линейных и циклических полиаминополикарбоксилатов и их производных (свойства, недостатки). Самоорганизации и включение комплексов с дифильными лигандами в мицеллы и везикулы, липосомы как способ проявления эффектов контрастирования в МРТ. 60. Возможности применения агрегированных металлокомплексов в качестве КА для МРТ.

**Тема 18. Контрастные МРТ-агенты на основе наночастиц**

контрольная работа , примерные вопросы:

Контрастные МРТ-агенты на основе самоорганизующихся наночастиц Контрольная работа Вопросы к контрольной работе приведены в разделе "Прочее"

**Тема . Итоговая форма контроля**

Примерные вопросы к зачету:

ПРИМЕРЫ БИЛЕТОВ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ИТОГОВОЙ АТТЕСТАЦИИ ПО ИТОГАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

1. Сферическое распознавание коронатами. Требования к субстратам, рецепторам, примеры.

2. Реакционная способность комплексов типа гость-хозяин. Роль комплексов металлов (на примере синтеза АТФ из АДФ).

3. Организованные ансамбли дифильных молекул. Влияние мономеров и агрегатов ПАВ на образование комплексов металлов в растворах.

◆ 2

1. Тетраэдрическое распознавание катионов. Требования к субстратам, рецепторам, примеры.

2. Транспорт субстратов. Механизмы, условия, требования к переносчику.

3. Валиномицин: строение, особенности внутримолекулярных водородных связей, связывание с катионами металлов.

Вопросы к контрольной работе

1. Понятия и язык супрамолекулярной химии.

2. Связь супрамолекулярной химии с другими областями науки: физикой, химией, биологией, материаловедением.

3. Супермолекулы и полимолекулярные ансамбли.

4. Основные функции супрамолекулярных образований (распознавание, перенос, превращение).

5. История развития химии макроциклических соединений.

6. Открытие краун-соединений, криптандов, метациклофанов.

7. Задачи и возможности супрамолекулярной химии.

8. Молекулярное распознавание как направленное связывание.

9. Комплексообразование типа "гость-хозяин" ("рецептор-субстрат"), основные понятия и признаки.

10. Комплексы макроциклических соединений с ионами металлов и молекулярными катионами как разновидность комплексов "гость-хозяин".

11. Природа взаимодействия донорных атомов макроциклических лигандов с ионами металлов и азотсодержащими катионами.

12. Виды распознавания: сферическое, тетраэдрическое, линейное.

13. Распознавание катионов, анионов, нейтральных молекул.

14. Особенности кристаллической структуры комплексов для разных видов рецепторов и субстратов.

15. Экспериментальные основы супрамолекулярной неорганической химии.

16. Макроциклические соединения. Номенклатура и классификация.

17. Типы лигандов: краун-эфиры, поданды, криптанды, кавитанды, сферанды, циклодекстрины, природные ионофоры, каликсарены, тиакаликсарены, кукурбитурилы - особенности строения, возможности образования комплексов с различными ионами и молекулами.

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

19. Концепция оптимального пространственного соответствия гостя и хозяина.

20. 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.

21. Влияние трехмерной структурной организации на эффективность и селективность координации ионов металлов на примере комплексообразования с подандами, краун-эфирами, криптандами, сферандами.

22. Влияние гидрофобной полости, фенольных гидрокси-групп и конформации хозяина на комплексообразование каликсаренов, каликсрезорцинаренов, кукурбитурилов и циклодекстринов с ионами металлов и молекулярными катионами.


ЭЛЕКТРОННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНФОРМАЦИОННО-АНАЛИТИЧЕСКАЯ СИСТЕМА КФУ

23. Факторы, определяющие селективность комплексообразования при отсутствии геометрической комплементарности рецептора и субстрата.

24. Природа и роль вклада CH-□ взаимодействий субстрата с ароматической системой рецептора в устойчивость комплекса.

25. Применение подандов, краун-соединений, криптандов, сферандов, кавитандов, каликсаренов и циклодекстринов.

26. Неорганический синтез. Разделение ионов металлов. Разделение изотопов. Применение в аналитической химии. Перенос ионов. Мембраны с избирательной проницаемостью.

27. Супрамолекулярный катализ реакций разложения и синтеза.

28. Моделирование деятельности ферментов (биомолекулярный и абиотический катализ).

29. Химические сенсоры. Переключающие устройства. Химионика. Неорганические двойные спирали; репликация.

30. Транспорт супермолекул.

31. Особенности комплексообразования макроциклов с ионами металлов на границе раздела фаз вода-органический растворитель (мембрана) в процессах экстракции и переноса.

32. Мембранный транспорт. Параметры, определяющие транспортные свойства лиганда.

33. Перенос посредством носителей и через трансмембранные каналы.

34. Механизм транспорта (унипорт, симпорт, антипорт).

35. Сопряженный перенос (катион-электрон, катион-протон, фотосопряженный процесс).

36. Метациклофаны (каликсарены, тиакаликсарены, каликсрезорцинарены). Применение солей в темплатном синтезе метациклофанов.

37. Координационные возможности метациклофанов (гидроксильные группы на верхнем и нижнем ободах, ароматическая полость).

38. Роль размера полости при росте числа олигомерных звеньев. Функционализация метациклофанов по нижнему и верхнему ободам.

39. Водорастворимые метациклофаны. Возможности агрегирования дифильных метациклофанов в воде, образование смешанных агрегатов с мицеллами ПАВ.

40. Природные рецепторы. Ионофоры (валиномицин, боверицин, энниатин, лазалоцид А, грамицидины).

41. Особенности строения и образования комплексов с катионами щелочных и щелочноземельных металлов.

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

43. Циклодекстрины - особенности строения природных циклодекстринов, возможности и роль функционализации по верхнему и нижнему ободу.

44. Движущие силы взаимодействия циклодекстринов с субстратами. Применение циклодекстринов в медицине для адресной доставки лекарственных препаратов.

45. Дифильные молекулы: особенности строения молекул, кристаллической структуры, растворов в воде и органических растворителях.

46. Поверхностно-активные вещества: классификация (коллоидные, неколлоидные), типы (анионные, катионные, неионные, цвиттерионные, высокомолекулярные).

47. Гидротропы. Свойства растворов поверхностно-активных веществ и гидротропов.

48. Мицеллообразование и ассоциация, критические концентрации мицеллообразования (ККМ), агрегации (ККА).

49. Типы образующихся агрегатов: малые агрегаты, прямые мицеллы (сферические, стержнеобразные), гексагональные фазы, обратные мицеллы, микроэмульсии, эмульсии.

50. Природные ПАВ. Липиды. Липосомы. Клеточные мембраны.

51. Связывание мицеллами ионов и молекул, влияние типа и концентрации ПАВ, размера, природы и заряда противоионов, добавок солей, состава растворителя.

52. Солюбилизация: движущие силы, влияние природы и концентрации солюбилизата, содержания добавок, свойств растворителя.


ЭЛЕКТРОННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНФОРМАЦИОННО-АНАЛИТИЧЕСКАЯ СИСТЕМА КФУ

53. Особенности протекания реакций комплексообразования в растворах ПАВ.

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

55. Особенности релаксации протонов в растворах парамагнитных металлокомплексов на основе соединений гадолиния(III) и марганца(II).

56. Контрастные агенты (КА) в магнитно-резонансной томографии (МРТ).

57. Коммерческие КА на основе линейных и циклических полиаминополикарбоксилатов и их производных (свойства, недостатки).

58. Проявление в ЯМ-релаксации связывания парамагнитных ионов с полимерными лигандами.

59. Самоорганизации и включение комплексов с дифильными лигандами в мицеллы и везикулы, липосомы как способ проявления эффектов контрастирования в МРТ.

60. Возможности применения агрегированных металлокомплексов в качестве КА для МРТ.

### 7.1. Основная литература:

Ядерный магнитный резонанс в неорганической и координационной химии (растворы и жидкости), Федотов, Мартин Александрович, 2009г.

1. Стид Дж.В., Этвуд Дж.Л. Супрамолекулярная химия. Пер. с англ. - М.: Академкнига, 2007, В 2 т. - 896 с.

2. Структурная самоорганизация в растворах и на границе раздела фаз / М. Г. Киселев и др.; отв. ред. А. Ю. Цивадзе. - Москва: URSS, 2008. - 539 с.

### 7.2. Дополнительная литература:

Соединения металлов как магнитно-релаксационные зонды для высокоорганизованных сред, Амиров, Рустэм Рафаэльевич, 2005г.

1. Койфман О.И. Синтетические рецепторы на основе порфиринов и их конъюгатов с каликс[4]аренами / О.И. Койфман, Н.Ж. Мамардашвили, И.С. Антипин; отв. ред. А.И. Коновалов; Ин-т химии растворов РАН. - М.: Наука, 2006. - 246 с.

2. Schneider, H.-J.; Yatsimirsky, A. "Principles and Methods in Supramolecular Chemistry"/ Wiley; Chichester, New York, Weinheim, Brisbane, Singapore, Toronto, 2000. - 697 pp.

3. Педерсен Ч.Д., Френсдорф Х.К. Макроциклические полиэфиры и их комплексы // Успехи химии. - 1973. - Т. 42, ◆ 3.

4. Хираока М. Краун-соединения. М.: Мир, 1986. - 363 с.

5. Пожарский А.Ф. Супрамолекулярная химия. Молекулярное распознавание // Соросовский образовательный журнал. 1997, ◆ 9. С.32-39.

6. Лен Ж.-М. Супрамолекулярная химия. Концепции и перспективы. - Новосибирск: Наука, 1998. - 334 с.

7. Химия комплексов "гость-хозяин" / Под ред. Ф.Фегтле, Э.Вебера. М.: Мир, 1988. - 511 с.

### 7.3. Интернет-ресурсы:

Клатраты гидрохинона - родоначальники клатратной химии - http://window.edu.ru/resource/485/21485

лекции по супрамолекулярной химии и нанофотонике - http://photonics.ru/learning/Lecturecourses.aspx

Сайт исследовательской группы по самоорганизованным системам института Шарля Садрона (Страсбург) - http://www-ics.u-strasbg.fr/spip.php?rubrique49&lang=en

Специальный выпуск "Молекулярное распознавание" журнала Int. J. Mol. Sci. - http://www.mdpi.org/ijms/sections/molecular-recognition.htm

Супрамолекулярная химия - http://www.chem.asu.ru/org/supramol/programm.html

Супрамолекулярная химия - http://en.wikipedia.org/wiki/Supramolecular_chemistry

Супрамолекулярная химия - http://ru.wikipedia.org/wiki/%D0%A1%D1%83%D0%BF%D1%80%D0%B0%D0%BC%D0%BE%D0%BB%

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

Освоение дисциплины "Супрамолекулярная неорганическая химия " 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 оборудованием имеет соответствующее лицензионное программное обеспечение.

1. Мультимедийный проектор и ноутбук.
2. Материалы для проведения круглых столов.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО и учебным планом по специальности: 020201.65 "Фундаментальная и прикладная химия" и специализации Неорганическая химия .

Автор(ы):
Амиров Р.Р. _____
"__" _____ 201 __ г.

Рецензент(ы):
Чевела В.В. _____
"__" _____ 201 __ г.