



**ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ  
УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ  
Институт физической химии и электрохимии  
им. А.Н. Фрумкина Российской академии наук  
(ИФХЭ РАН)**

**Рабочая программа дисциплины «Супрамолекулярная химия»**

По направлению подготовки 04.06.01 – Химические науки (уровень подготовки  
кадров высшей квалификации)

**по специальности 02.00.01 Неорганическая химия**

Москва

2014 год

## **1. Цели и задачи освоения дисциплины**

### Цели дисциплины

Освоение аспирантами системы знаний о фундаментальных теоретических и экспериментальных основах супрамолекулярной химии; знакомство с современными достижениями супрамолекулярной химии, изучающей закономерности образования и устойчивости надмолекулярных ансамблей и структур, играющих важную роль в нанохимии и биологии.

### Задачи:

Формирование представления об основных принципах организации молекулярных структур в супрамолекулярные ансамбли. Изучение основных принципов инжиниринга молекулярных кристаллов и супрамолекулярных систем. Приобретение практических навыков в области физико-химических методов исследования супрамолекулярных ансамблей. Формирование представлений о современных достижениях в конструировании молекулярных устройств.

## **2. Место дисциплины в структуре ООП**

Настоящая дисциплина «Супрамолекулярная химия» - модуль основной образовательной программы высшего образования – программы подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре по специальности 02.00.01- неорганическая химия.

Обучающийся по данной дисциплине должен знать основные молекулярных составляющие супрамолекулярных систем, особенности их структурной организации; иметь представление об основных принципах самоорганизации супрамолекулярных структур и методах исследования супрамолекулярных ансамблей; уметь оценивать возможность образования комплексов «гость-хозяин» для выбранной пары соединений по параметрам химических структур по набору и геометрии расположения функциональных групп, оценивать потенциальные возможности (предорганизацию) молекулярных систем, выбрать метод исследования супрамолекулярных комплексов заданного типа.

## **3. Требования к результатам освоения дисциплины**

3.1. В результате освоения программы аспирантуры в рамках данной дисциплины у выпускника должны быть сформированы универсальные, общепрофессиональные и профессиональные компетенции.

3.2. Выпускник, освоивший программу аспирантуры в рамках данной дисциплины, должен обладать следующими универсальными компетенциями:

- способностью к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях (УК-1);
- способностью проектировать и осуществлять комплексные исследования, в том числе междисциплинарные, на основе целостного системного научного мировоззрения с использованием знаний в области истории и философии науки (УК-2);
- готовностью участвовать в работе российских и международных исследовательских коллективов по решению научных и научно-образовательных задач (УК-3);
- готовностью использовать современные методы и технологии научной коммуникации на государственном и иностранном языках (УК-4);
- способностью планировать и решать задачи собственного профессионального и личностного развития (УК-5);

3.3. Выпускник, освоивший программу аспирантуры в рамках данной дисциплины, должен обладать следующими общепрофессиональными компетенциями:

- способностью самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий (ОПК-1);
- готовностью организовать работу исследовательского коллектива в области химии и смежных наук (ОПК-2);
- готовностью к преподавательской деятельности по основным образовательным программам высшего образования (ОПК-3).

3.4. Выпускник, освоивший программу аспирантуры в рамках данной дисциплины, должен обладать следующими профессиональными компетенциями:

- способностью выбирать оптимальные решения при выборе синтетических подходов к получению супрамолекулярных систем (ПК-1);

- способностью к оптимизации условий проведения реакций (ПК-2);
- способностью систематизировать и обобщать как уже имеющуюся в литературе, так и самостоятельно полученную в ходе исследований информацию (ПК-3);
- способностью к анализу основных характеристик, полученных различными спектральными методами, с целью приобретения сведений о структуре соединений (ПК-4);
- способностью самостоятельно приобретать и использовать в практической деятельности новые знания и умения (ПК-5).

#### 4. Структура и содержание дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 зачетных единицы (72 часа).

##### 4.1 Структура дисциплины

№ п/п	Наименование дисциплины	Объем учебной работы (в часах)						Вид итогового контроля	
		Всего	Всего аудит.	Из аудиторных					Сам. работа
				Лекц.	Лаб.	Прак.	КСР.		
1	Супрамолекулярная химия	72	72	36		36		зачет	

##### 4.2. Содержание дисциплины

###### 4.2.1 Разделы дисциплины и виды занятий

№ п/п	Раздел Дисциплины	Виды учебной работы, и трудоемкость (в часах)				Самостояте льная работа	Вид итогового контроля
		Лек.	Лаб.	Прак.	КСР		
1	Супрамолекулярная химия	36		36			Зачет

#### 4.2.2 Содержание разделов дисциплины

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела (темы)	Форма проведения занятий
1	<b>Супрамолекулярная химия</b>	<p>1. Общие представления. Классификация супрамолекулярных соединений «хозяин - гость». Рецепторы, координация и аналогия «замок-ключ». Хелатный и макроциклический эффекты. Предорганизация и комплементарность. Природа супрамолекулярных взаимодействий.</p> <p>2. Химия жизненноважных процессов. Связывание и транспорт кислорода гемоглобином. Биохимическая сборка.</p> <p>3. Химия краун-соединений. Краун-эфиры: открытие и область применения, синтез. Селективность катионного комплексообразования с участием краун-эфиров. Супрамолекулярная химия краун-замещенных порфиринов и фталоцианинов металлов.</p> <p>4. Связывание анионов. Биологические рецепторы анионов.</p> <p>5. Связывание нейтральных молекул. Фуллерены.</p> <p>6. Инженерия кристаллов. Координационные полимеры. Биомиметические структуры.</p> <p>7. Темплаты и самосборка: цели и задачи, терминология. Биохимическая самосборка. Темплатные эффекты в синтезе. Термодинамическая модель: самосборка порфириновых комплексов цинка.</p> <p>8. Молекулярные устройства. Материалы для нелинейной оптики: основы нелинейной оптики, материалы для нелинейной оптики второго и третьего порядков.</p> <p>9. Биомиметика. Супрамолекулярная биохимия.</p>	Лекции, лабораторные работы

#### 5. Образовательные технологии

1. Активные образовательные технологии: лекции, семинары и практические работы.
2. Сопровождение лекций визуальным материалов в виде слайдов, подготовленных с использованием современных компьютерных технологий (программный пакет презентаций Microsoft Office Powerpoint), проецируемых на экран с помощью видеопроектора, а компьютерных моделей органических соединений и их спектров.
3. Проведение практических работ в научной лаборатории, участие обучающихся в научной работе и выполнении исследовательских проектов.
4. Использование специального программного обеспечения и интернет-ресурсов для обучения в ходе практических и самостоятельных работ.

**6. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы аспирантов. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины.**

Виды самостоятельной работы: в домашних условиях, в читальном зале библиотеки, на компьютерах с доступом к базам данных и ресурсам Интернет, в лабораториях с доступом к лабораторному оборудованию и приборам.

Самостоятельная работа подкрепляется учебно-методическим и информационным обеспечением, включающим учебники, учебно-методические пособия, конспекты лекций, учебное и научное программное обеспечение, ресурсы Интернет.

Форма контроля знаний – зачет в конце курса, включающий теоретические вопросы и задачу.

Контрольные вопросы к зачету:

**Супрамолекулярная химия**

Общие представления. Определение и развитие супрамолекулярной химии: что такое супрамолекулярная химия, химия «хозяин - гость», развитие представлений. Классификация супрамолекулярных соединений «хозяин - гость». Рецепторы, координация и аналогия «замок-ключ». Хелатный и макроциклический эффекты. Предорганизация и комплементарность. Термодинамическая и кинетическая селективность. Невалентные взаимодействия. Природа супрамолекулярных взаимодействий: ион-ионные, ион-дипольные, диполь-дипольные, водородная связь, катион –

$\pi$ - взаимодействия,  $\pi$ - $\pi$  - стэкинг-взаимодействия; силы Ван-дер-Ваальса, плотная упаковка в твердом состоянии, гидрофобные эффекты. Супрамолекулярное конструирование хозяина.

Химия жизненно-важных процессов. Катионы щелочных металлов в биохимии: мембранные потенциалы и мембранный транспорт. Связывание и транспорт кислорода гемоглобином – природным порфирином. Биохимическая сборка.

Химия краун-соединений. Краун эфиры: открытие и область применения, синтез. Селективность катионного комплексообразования с участием краун-эфиров. Макроциклический, макробикиклический и темплатный эффекты. Супрамолекулярная химия краун-замещенных порфиринов и фталоцианинов металлов.

Связывание анионов. Биологические рецепторы анионов: белки, связывающие фосфаты и сульфаты; аргинин как центр связывания анионов. Концепции конструирования хозяина для анионов.

Связывание нейтральных молекул. Фуллерены как гости и как хозяева. Фуллерены как сверхпроводящие соединения включения.

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

Темплаты и самосборка: цели и задачи, терминология. Биохимическая самосборка. Самосборка в синтетических системах: кинетический и термодинамический подходы. Темплатные эффекты в синтезе. Самоорганизация порфиринов различных металлов.

Молекулярные устройства. Материалы для нелинейной оптики: основы нелинейной оптики, материалы для нелинейной оптики второго и третьего порядков.

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

## **7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины**

а) основная литература:

1. Сид Дж. В., Этвуд Дж. Л., Супрамолекулярная химия. - т. 1, 2. – М., Академкнига, 2007.
2. Нанотехнологии. Азбука для всех. / Под ред. акад. Третьякова Ю. Д., М.: Физматлит, 2008.

3. Шевельков, А. В. Супрамолекулярная химия : от экзотических веществ к материалам нового поколения. М., МГУ, 2004, 47 с.

б) дополнительная литература:

1. Лен Ж.-М., Супрамолекулярная химия. - Новосибирск: Наука, 1998.

в) программное обеспечение и Интернет-ресурсы:

[www.chemport.ru](http://www.chemport.ru) – образовательный сайт по химии;

[www.humuk.ru](http://www.humuk.ru) – классические учебники по неорганической химии, химические энциклопедии;

[www.ximicat.com](http://www.ximicat.com) – химический каталог, содержащий сведения об учебниках, монографиях по неорганической химии;

[www.iupac.org](http://www.iupac.org) – официальный сайт IUPAC;

[www.e-science.ru](http://www.e-science.ru) – портал естественных наук, теоретическая база по химии

[www.naukaspb.spb.ru](http://www.naukaspb.spb.ru) , [www.chemjournals.net](http://www.chemjournals.net) – сайт Журнала общей химии

РАН;

<http://spp.u-bourgogne.fr/> - сайт международного общества порфиринов и фталоцианинов

- научная электронная библиотека РФФИ (e-Library).

## **8. Материально-техническое обеспечение дисциплины**

НОК располагает материально-технической базой, обеспечивающей проведение всех видов теоретической и практической подготовки, предусмотренных учебным планом, а также эффективное выполнение диссертационной работы:

Аудитория для проведения лекций, оснащенная компьютером и проектором для показа слайдов компьютерных презентаций. Компьютеры, объединенные в локальную сеть с выходом в Интернет и подключенные к международным и российским научным базам данных и электронной библиотеке с основными международными научными журналами.

Инструментальная база НОК основана на центре коллективного пользования физическими методами исследования ИФХЭ РАН. В составе имеющегося оборудования ЯМР-спектрометр фирмы «Брукер»: AVANCE II DRX-600, масс-спектрометр MALDI-TOF Bruker ultraflex III, масс-



спектрометр ICP-MS - Bruker Daltonics aurora M90, спектрофотометр УФ и видимой области Specord M400, ИК-спектрометр Perkin-Elmer-2000, спектрофотометр Agilent 8453, сканирующий зондовый микроскоп Solver P47 PRO, атомно-силовой микроскоп – спектрометр Force Master 402 MD, рентгено-флюороресцентный микроанализатор VRA-30, рентгеновский дифрактометр Shimadzu XRD-6000 и многие другие приборы, позволяющие решить практически любую задачу физико-химического исследования. Лаборатории оснащены современными приборами для проведения и исследования каталитических реакций: стеклопосуда в широком ассортименте, реакторы низкого и высокого давления, автоклавы, газовые и жидкостные хроматографы, адсорбционные установки для текстурных исследований катализаторов.

Программа составлена в соответствии с требованиями приказа Минобрнауки России от 30 июля 2014 г. N 869 «Об утверждении федерального государственного образовательного стандарта высшего образования по направлению подготовки 04.06.01 химические науки (уровень подготовки кадров высшей квалификации)».

Программу составила:

Главный научный сотрудник лаборатории  
новых физико-химических проблем

д.х.н.

Ю.Г. Горбунова

Программа утверждена на заседании секции при Ученом совете ИФХЭ РАН  
«Физикохимия нано- и супрамолекулярных систем»  
протокол № 54 от 16.06. 2014 г.

Ученый секретарь секции

д.х.н.

В.А. Котенев