

**МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ
ФЕДЕРАЦИИ**

**ФГАОУ ВО "Новосибирский национальный
исследовательский государственный университет"**

Факультет естественных наук

УТВЕРЖДАЮ

Декан ФЕН НГУ, профессор



Резников В.А.

«29» августа 2014 г.

Супрамолекулярная химия

Программа лекционного курса и самостоятельной работы студентов

Курс 1-й магистратуры, I семестр

Учебно-методический комплекс

Новосибирск 2014

Учебно-методический комплекс предназначен для студентов I курса магистратуры факультета естественных наук, направление подготовки 020100 «Химия (магистр)». В состав пособия включены: программа курса лекций, программа самостоятельной работы студента, структура курса, условия сдачи дифференцированного зачета. Кроме того, приведены примеры задач, предлагаемых на зачете, примеры теоретических вопросов, задаваемых на зачете, примеры экзаменационных билетов, перечень рекомендуемой литературы.

Составители

Болдырева Е.В., д.х.н., проф., Хлесткин В.К., к.х.н., доц., Малыгин А.А., к.х.н., доц..

© Новосибирский государственный университет, 2014

Содержание

| | |
|---|-----------|
| Аннотация рабочей программы | 4 |
| 1. Цели освоения дисциплины | 5 |
| 2. Место дисциплины в структуре ООП | 5 |
| 3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины | 5 |
| 4. Структура и содержание дисциплины | 6 |
| 5. Образовательные технологии | 7 |
| 6. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины | 8 |
| 7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины | 10 |
| 8. Материально-техническое обеспечение дисциплины | 11 |

Аннотация рабочей программы

Дисциплина «Супрамолекулярная химия» относится к базовой части профессионального (специального) цикла ООП по направлению подготовки «020100 ХИМИЯ» (квалификация (степень) магистр). Дисциплина реализуется на Факультете естественных наук Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования "Новосибирский национальный исследовательский государственный университет" (НГУ) кафедрой химии твердого тела.

Содержание дисциплины охватывает круг вопросов, связанных с химией за пределами молекул, рассматривается роль нековалентных взаимодействий в химии и биологии. Студенты знакомятся с основными концепциями и направлениями исследований в области супрамолекулярной химии, с основными объектами, методами и перспективами развития супрамолекулярной химии.

Дисциплина нацелена на формирование общекультурных компетенций ОК-5, профессиональных компетенций ПК-1, ПК-2, ПК-3 выпускника.

Преподавание дисциплины предусматривает следующие формы организации учебного процесса: лекции, самостоятельная работа студента, сдача дифференцированного зачета.

Программой дисциплины предусмотрены следующие виды контроля:

Текущий контроль осуществляется путем контроля посещаемости, а также неформализованного опроса студентов по пройденным темам.

Итоговый контроль в конце семестра осуществляется путем подготовки и сдачи реферата (в письменной форме и форме научного доклада), либо дифференцированного зачета (по выбору студента).

Общая трудоемкость дисциплины составляет 1 зачетную единицу, 36 академических часов вместе с самостоятельной работой студентов и дифференцированным зачетом. Программой дисциплины предусмотрены 20 часов лекционных занятий, 16 часов самостоятельной работы студентов, включая часы на подготовку к дифференцированному зачету и сдачу зачета.

1. Цели освоения дисциплины

Основной целью освоения дисциплины «Супрамолекулярная химия» является получение студентами знаний о химии за пределами молекул, о роли нековалентных взаимодействий в химии и биологии.

В данном курсе рассматриваются основные понятия и термины супрамолекулярной химии, история становления ее как самостоятельной междисциплинарной науки, основные виды межмолекулярных взаимодействий, основные методы исследования нековалентных взаимодействий, нековалентные взаимодействия в органической химии, влияние среды на протекание химических реакций, супрамолекулярные системы на основе "гость-хозяин", роль нековалентных взаимодействий в химических реакциях в кристаллах, влияние кристаллического окружения на внутримолекулярные превращения, нековалентные взаимодействия в биохимических системах, структура и супрамолекулярные системы на основе белков и нуклеиновых кислот, основные принципы устройства и работы биологических макромолекулярных машин.

Для достижения поставленной цели выделяются задачи курса: ознакомление студентов с теоретическими основами и современным состоянием раздела науки «супрамолекулярная химия»; теоретическое ознакомление с экспериментальными методами изучения супрамолекул; обучение работе с литературными источниками.

2. Место дисциплины в структуре ООП

Дисциплина «Супрамолекулярная химия» является частью профессионального (специального) цикла ООП, базовая часть (общепрофессиональные дисциплины), по направлению подготовки «020100 ХИМИЯ», уровень подготовки – «магистр».

Дисциплина «Супрамолекулярная химия» опирается на следующие дисциплины данной ООП по направлению подготовки «020100 ХИМИЯ», уровень подготовки – «бакалавр»:

- Физическая химия;
- Неорганическая химия;
- Органическая химия;
- Химия твердого тела;
- Молекулярная биология.

Результаты освоения дисциплины «Супрамолекулярная химия» используются в следующих дисциплинах данной ООП:

- Специальные дисциплины "химия твердого тела и химия материалов", «неорганическая химия», «органическая химия», «физическая химия»: «Кластерные соединения», «Основы кристаллохимии», «Соединения включения», «Функциональные материалы», «Кинетика гетерогенных реакций», «Методы кристаллоструктурных исследований», «Термический анализ», «Физико-химическая механика и механохимия», «Химия поверхности», «Физические методы исследования твердых тел», «Введение в физические свойства твердых тел», «Колебательная спектроскопия твердых тел».

3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины «Супрамолекулярная химия»:

- **общекультурные компетенции:**
 - *владение современными компьютерными технологиями, применяемыми при обработке результатов научных экспериментов и сборе, обработке, хранении и передаче информации при проведении самостоятельных научных исследований (ОК-5)*
- **профессиональные компетенции:**
 - *наличие представления об актуальных направлениях исследований в современной теоретической и экспериментальной химии (синтез и применение веществ в*

наноструктурных технологиях, исследования в критических условиях, химия жизненных процессов, химия и экология и другие) (ПК-1);

- знание основных этапов и закономерностей развития химической науки, понимание объективной необходимости возникновения новых направлений, наличие представления о системе фундаментальных химических понятий и методологических аспектов химии, форм и методов научного познания, их роли в общеобразовательной профессиональной подготовке химиков (ПК-2);
- владение теорией и навыками практической работы в избранной области химии (в соответствии с профильной направленностью магистерской диссертации) (ПК-3)

В результате освоения дисциплины обучающийся должен:

- знать основные понятия супрамолекулярной химии, теорию в рамках представленной программы, перспективы развития супрамолекулярной химии;
- уметь проводить литературный поиск, поиск в базах структурных данных, анализировать информацию, выделяя основные проблемы из области супрамолекулярной химии;
- владеть навыками поиска в базах структурных данных.

4. Структура и содержание дисциплины.

Общая трудоемкость дисциплины составляет 1 зачетную единицу, 36 часов.

| № п/п | Раздел дисциплины | Семестр | Неделя семестра | Виды учебной работы, включая самостоятельную работу студентов и трудоемкость (в часах) | | | Формы текущего контроля успеваемости (по неделям семестра) Форма промежуточной аттестации |
|-------|---|---------|-----------------|--|----------------|-------|--|
| | | | | Лекция | Самост. работа | Зачет | |
| 1.1 | Введение. Предмет супрамолекулярной химии. История становления ее как самостоятельной междисциплинарной науки. Основные понятия и термины. Примеры. | 1 | 1 | 2 | 1 | | |
| 1.2 | Основные виды нековалентных взаимодействий. Обзор методов их исследования. Кристалл как супрамолекулярный ансамбль. Влияние кристаллического окружения на внутримолекулярные превращения. | 1 | 2 | 2 | 1 | | |
| 2.1 | Нековалентные взаимодействия в органической химии. Основные классы органических супрамолекулярных структур и их компонентов. Краун-эфиры, строение, методы синтеза, применение. | 1 | 3 | 2 | 1 | | |
| 2.2 | Циклодекстрины, каликсарены. Методы получения, супрамолекулярные комплексы гость-хозяин, применение. | 1 | 4 | 2 | 1 | | |
| 2.3 | Кукурбитурил. Дендримеры. Методы исследования супрамолекулярных систем. | 1 | 5 | 2 | 1 | | |
| 2.4 | Супрамолекулярные системы на сильных водородных связях. | 1 | 6 | 2 | 1 | | |
| 2.5 | Поверхностные структуры: самоорганизующиеся слои. Пленки Лэнгмюра-Блоджетт. Самоорганизация амфифильных молекул., роль нековалентных взаимодействий. | 1 | 7 | 2 | 1 | | |
| 3.1 | Нековалентные взаимодействия в биохимических системах. Структура биополимеров (нуклеиновых кислот и | 1 | 8 | 2 | 1 | | |

| | | | | | | | |
|-----|--|---|----|-----------|-----------|----------|--------------------------|
| | белков). | | | | | | |
| 3.2 | Специфические взаимодействия нуклеиновых кислот. Методы конструирования биополимеров с заданными свойствами. | 1 | 9 | 2 | 1 | | |
| 3.3 | Методы исследования структуры биополимеров. | 1 | 10 | 2 | 1 | | |
| | | | | | 4 | 2 | Дифференцированный зачет |
| | | | | 20 | 14 | 2 | Всего 36 час |

Программа курса.

Часть 1. Основные понятия и межмолекулярные взаимодействия.

➤ Лекция 1. Основные понятия и термины супрамолекулярной химии. Введение. Предмет супрамолекулярной химии. История становления ее как самостоятельной междисциплинарной науки. Примеры.

➤ Лекция 2. Основные виды межмолекулярных взаимодействий. Основные виды нековалентных взаимодействий. Обзор методов их исследования. Кристалл как супрамолекулярный ансамбль. Влияние кристаллического окружения на внутримолекулярные превращения.

Часть 2. Супрамолекулярные соединения органических молекул.

➤ Лекция 3. Нековалентные взаимодействия в органической химии.

Основные классы органических супрамолекулярных структур и их компонентов. Краун-эфиры и родственные соединения, строение, методы синтеза, применение. Порфирины, ротаксаны, катенаны.

➤ Лекция 4. Циклодекстрины, каликсарены. Методы получения, супрамолекулярные комплексы гость-хозяин, применение.

➤ Лекция 5. Кукурбитурил. Дендримеры. Методы исследования супрамолекулярных систем

➤ Лекция 6. Комплексы за счет сильной водородной связи и других взаимодействий. Рецепторы. Супрамолекулярные устройства.

➤ Лекция 7. Поверхностные структуры: самоорганизующиеся слои. Пленки Лэнгмюра-Блоджетт. Самоорганизация амфифильных молекул., роль нековалентных взаимодействий.

Часть 3. Супрамолекулярная биохимия.

➤ Лекция 8. Нековалентные взаимодействия в биохимических системах. Структура биополимеров (нуклеиновых кислот и белков).

➤ Лекция 9. Специфические взаимодействия нуклеиновых кислот. Методы конструирования биополимеров с заданными свойствами.

➤ Лекция 10. Методы исследования структуры биополимеров.

Часть 4. Доклады студентов по рефератам, зачет.

5. Образовательные технологии

Основные образовательные технологии: лекционная система обучения, а также обучение на основе опыта поиска и анализа литературных данных.

Лекции читаются специалистами трех направлений: кристаллографии, органической химии и биохимии. Кроме того, студенты (по выбору) выбирают и анализируют одну из тем по дисциплине «Супрамолекулярная химия», составляют реферат и представляют его в форме доклада.

Преподаватели, участвующие в проведении курса, регулярно готовят и издают учебно-методические пособия, посвященные различным разделам курса. Эти пособия размещаются и в электронном виде на сайте кафедры. Там же можно найти мультимедийную

презентацию лекционного курса, перечень вопросов к экзаменам, примеры типовых задач, а также дополнительные материалы, полезные для прохождения курса.

6. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов.

Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины.

Рекомендуемый режим работы: лекционные занятия – 2 часа в неделю; а также самостоятельные занятия с обязательной и дополнительной литературой, научной периодикой (для подготовки рефератов).

Аттестация по итогам освоения дисциплины проводится в виде дифференцированного зачета. Вопросы к зачету и материалы лекций в виде презентаций представлены на сайте ФЕН НГУ.

Список тем - вопросов

Как правило, каждый экзаменационный билет включает в себя три вопроса по одной из этих тем, из трех частей (супрамолекулярная химия кристаллов, растворов или поверхностей, биологических объектов). Три правильных ответа – «отлично», два – «хорошо», один – «удовлетворительно», и так далее. Иногда вместо общего широкого вопроса (типа «Все о циклодекстринах») в билетах встречается сразу более узкий, дополнительный вопрос по теме.

Супрамолекулярная химия кристаллов.

1. Предмет супрамолекулярной химии. «Коллективы» молекул. Влияние среды на свойства химических соединений. Молекулы в составе молекулярных «коллективов». Влияние внешних условий на «коллективы» молекул. Направления исследований в супрамолекулярной химии.
2. Кристалл как супрамолекулярный ансамбль. Основные виды нековалентных взаимодействий. Комплексы гость – хозяин, примеры неорганических соединений – хозяев и гостей.

Супрамолекулярная химия в растворах и на поверхностях.

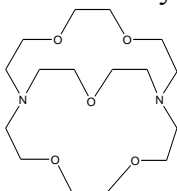
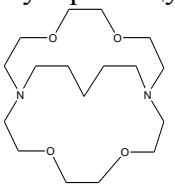
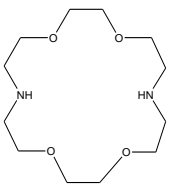
3. Молекулярное распознавание. Краун – эфиры: определение, виды, получение, свойства, супрамолекулярные комплексы, применение, аналоги. Хелатный и макроциклический эффекты.
4. Порфирины, ротаксаны, катенаны: определение, получение, свойства, супрамолекулярные комплексы, применение, аналоги.
5. Циклодекстрины: определение, виды, получение, свойства, супрамолекулярные комплексы, применение, аналоги.
6. Каликсарены: определение, виды, получение, свойства, супрамолекулярные комплексы, применение, аналоги.
7. Кукурбитурил: определение, виды, получение, свойства, супрамолекулярные комплексы, применение, аналоги.
8. Дендримеры: определение, виды, получение, свойства, супрамолекулярные комплексы, применение.
9. Самоорганизация амфифильных молекул.
10. Методы исследования супрамолекулярных соединений в растворах.

Супрамолекулярная химия в биологических объектах.

11. Супрамолекулы и супрамолекулярные ансамбли в биохимии. Биополимеры, их формирование и структура. Самоорганизация и самосборка.
12. Транскрибция. Трансляция. Рибосома как супрамолекулярный ансамбль. Молекулярный механизм трансляции. ПЦР (основы).
13. Методы исследования структуры биополимеров.

Примеры билетов на дифференцированный зачет

Билет 1.

| Фамилия студента: | Зачет по предмету «Супрамолекулярная химия» | Оценка | |
|-------------------|---|---|---|
| Вопрос 1: | Ван дер Ваальсовы взаимодействия, их природа, в чем проявляются, молекулярные ансамбли на их основе. | | |
| Вопрос 2: | Антибиотики, направленные на подавление трансляции. Причины возникновения резистентных форм бактерий. | | |
| Вопрос 3: | Логарифмы констант связывания K^+ (M^{-1} , MeOH, 25°C) для трех хозяев приведены ниже. Объясните такую большую разницу. | | |
| |  |  |  |
| $\lg K_1(K^+)$ | 9.0 | 5.4 | 2.0 |

Билет 2.

| Фамилия студента: | Зачет по предмету «Супрамолекулярная химия» |
|-------------------|--|
| Вопрос 1: | ЯМР-титрование. |
| Вопрос 2: | Методы исследования структуры биополимеров. |
| Вопрос 3: | Изобразите относительную шкалу сил супрамолекулярных взаимодействий. Сопоставьте ее со шкалой важности этих взаимодействий в супрамолекулярном дизайне хозяина для металлических катионов, принимая во внимание такие факторы, как направленность, легкость встраивания в каркас хозяина и склонность к усилению связывания за счет многоцентровых взаимодействий. Изменится ли эта оценка, если Вам нужно было бы сконструировать хозяина для анионов или нейтральных молекул? Какие взаимодействия могли бы быть важны при конструировании |

хозяина для следующих частиц: метан, бензол, метанол, фенол, аммоний, Cl⁻, Na⁺, Ni²⁺?

Примерный список тем рефератов по дисциплине «Супрамолекулярная химия», выбиравшихся студентами для самостоятельной подготовки

1. Кукурбит[8]урил.
 2. Строение целлюлазы и особенности ферментативного гидролиза целлюлозы.
 3. Перспективы использования МОК в медицине.
 4. Шапероны.
 5. Каликсарены и их использование в качестве каталитических систем на примере Вакер-процесса.
 6. Использование циклодекстринов(ЦД) в фармакологии. Молекулярные ожерелья(МО) на основе ЦД.
 7. G-квадруплексы.
 8. Каталитические свойства металл-органических координационных полимеров.
 9. Применение супрамолекулярных систем в фотохимии.
 10. Ионные каналы. Структура, свойства и молекулярные механизмы.
- и другие темы.**

7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

Рекомендованная литература к курсу «Супрамолекулярная химия»

Основная литература

1. *Горячие точки супрамолекулярной химии: Материалы учебно-методической конференции “Опыт введения новейших достижений супрамолекулярной химии в программы средних и высших учебных заведений”*. Под. Ред. Е. В. Болдыревой. Новосибирск: Новосиб. Гос. Ун-т, 2002.
2. Лен Жан-Мари. *Супрамолекулярная химия: Концепции и перспективы*. Пер. с англ. Новосибирск: Наука. Сиб. Предприятие РАН, 1998.
3. Супрамолекулярная химия. В 2-х томах. Дж. В. Стив, Дж. Л. Атвуд, 2007, Академкнига, 896 страниц.
4. Encyclopedia of supramolecular chemistry, Volumes 1 and 2, edited by J.L. Atwood, J.W. Steed, Publisher: Marcel Dekker, 2004, 1649 pages, ISBN: 0824747232.

Дополнительная литература

1. *Reactivity of Molecular Solids*. Ed. by E. Boldyreva, V. Boldyrev, The Molecular Solid State Series Vol. 3, Wiley, Chichester, 1999.
2. *Crystallography of Supramolecular Compounds*. Ed. by G. Tsoucaris, J.L. Atwood, J. Lipkowski, NATO ASI Series, C: Mathematical and Physical Sciences, vol. 480, Kluwer, Dordrecht, 1996.

3. NMR in supramolecular chemistry, by Miquel Pons, 1999, Springer Science & Business Media, 337 pages.
4. Interfacial supramolecular assemblies, J.G.Vos, R.J.Forster, T.E.Keyes, John Willey & Sons, 2003, 332 pages.
5. Supramolecular structure and function, G.Pifat-Mrzljak, 2007, Springer Science & Business Media, 328 pages.

Кроме того, рекомендуется ознакомиться с российскими и зарубежными обзорными журналами по химии, которые публикуют развернутые обзоры по различным аспектам супрамолекулярной химии (Успехи химии, Chemical Review, Accounts of Chemical Research и другие).

Интернет-ресурсы

1. Сайт Кембриджского банка данных CCDC <http://www.ccdc.cam.ac.uk/>.

Обучающиеся интенсивно используют ресурсы информационно-телекоммуникационной сети "Интернет" для работы в ходе освоения курса. В первую очередь это базы научных публикаций eLibrary.ru, Scopus, Science Research Portal, Medline, SciNet. Активно используются сайты известных научных организаций, таких как Springer или American Chemical Society. Для коммуникации со студентами в период самостоятельной работы над рефератами используется почтовый адрес на портале Yandex.

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины

- Ноутбук, медиа-проектор, экран.
- Программное обеспечение для демонстрации слайд-презентаций.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО и с ОС ВПО, принятым в ФГАОУ ВО Новосибирский национальный исследовательский государственный университет, с учетом рекомендаций ООП ВПО по направлению «020100 ХИМИЯ».

Авторы: Болдырева Елена Владимировна, д.х.н., профессор, зав. кафедрой химии твердого тела ФЕН, г.н.с. ИХТТМ СО РАН

Хлесткин Вадим Камильевич, к.х.н., доцент кафедры химии твердого тела ФЕН

Малыгин Алексей Аркадьевич, к.х.н., доцент кафедры химии твердого тела ФЕН, с.н.с. ИХБФМ СО РАН

Программа одобрена на заседании кафедры химии твердого тела
" 29 " августа 2014 г.

Секретарь кафедры, к.х.н



Т. Н. Дребушак