

ГОУ ВПО «ДОНЕЦКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

КАФЕДРА ФИЗИЧЕСКОЙ ХИМИИ



УТВЕРЖДАЮ:

Проректор по научно-методической
и учебной работе

Е.И. Скафа

22 апреля 2020 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

«СУПРАМОЛЕКУЛЯРНАЯ ХИМИЯ»

Направление подготовки:	04.04.01 Химия
Магистерская программа:	химия
Образовательная программа:	академическая магистратура
Квалификация:	магистр
Форма обучения:	<u>очная</u> , очно-заочная, заочная

Донецк 2020

УТВЕРЖДАЮ:

Декан химического факультета

А.В. Белый

«16» апреля 2020 г.



Программа составлена на основании Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования (ФГОС ВО) направления подготовки 04.04.01 Химия, утвержденного приказом Министерства образования и науки Российской Федерации № 655 от 13 июля 2017 г.;

Порядка организации учебного процесса в образовательных организациях высшего профессионального образования Донецкой Народной Республики, утвержденного приказом Министерства образования и науки ДНР № 1171 от «10» ноября 2017 г.;

учебного плана и основной образовательной программы высшего профессионального образования направления подготовки 04.04.01 Химия, разработанных в ГОУ ВПО «Донецкий национальный университет».

Разработчик:

Доцент кафедры физической химии,
к.х.н., доцент

Н.А. Туровский

Программа учебной дисциплины утверждена на заседании кафедры физической химии

Протокол № 13 от «28» марта 2020 г.

Заведующий кафедрой

В.М. Михальчук

Программа учебной дисциплины одобрена учебно-методической комиссией химического факультета

Протокол № 3 от «15» апреля 2020 г.

Председатель учебно-методической
комиссии факультета

Н.В. Яблочкова

1. ОБЛАСТЬ ПРИМЕНЕНИЯ И МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В УЧЕБНОМ ПРОЦЕССЕ

Дисциплина «Супрамолекулярная химия» относится к вариативной части (Б1.В.ДВ.3) учебного плана по направлению подготовки 04.04.01 Химия (магистерская программа Химия). Дисциплина реализуется на химическом факультете кафедрой физической химии. Для изучения данной учебной дисциплины необходимы знания, умения и навыки, формируемые предшествующими и сопутствующими дисциплинами: неорганическая, органическая, физическая химия. Дисциплина «Супрамолекулярная химия» является основой для прохождения научной практики и выполнения выпускной работы магистра. Химик, после изучения данной дисциплины, должен обладать способностями и умениями самостоятельно добывать знания из различных источников, систематизировать полученную структурную информацию. Формирование такого умения происходит за счет участия обучающихся в занятиях, выполнения контрольных заданий и тестов, выполнения лабораторных работ, написания курсовых и выпускных квалификационных работ. При этом самостоятельная работа студентов играет решающую роль в ходе всего учебного процесса.

2. СТРУКТУРА ДИСЦИПЛИНЫ

<i>Характеристика учебной дисциплины</i>		
Направление подготовки	04.04.01 Химия	
Магистерская программа	Химия	
Образовательная программа	академическая магистратура	
Квалификация	магистр	
Количество содержательных модулей	1	
Дисциплина базовой / вариативной части образовательной программы	вариативная часть	
Формы контроля (МК, экзамен, зачет)	1 модульный контроль, 1 экзамен	
Показатели	очная форма обучения	заочная форма обучения
Количество зачетных единиц (кредитов)	3	
Год подготовки	1	
Семестр	2	
Количество часов	108	
- лекционных	14	
- практических, семинарских	-	
- лабораторных	14	
- самостоятельной работы	80	
в т.ч. индивидуальное задание	-	
Недельное количество часов,	7.2	
в т.ч. аудиторных	2	

3. ОПИСАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Цели и задачи

Цель изучения дисциплины «Супрамолекулярная химия» – формирование у студентов панорамы знаний о атомно-молекулярной архитектуре и электронной структуре химических соединений на молекулярном и супрамолекулярном уровнях.

Задачи дисциплины:

- раскрыть панораму концепций супрамолекулярной химии;
- раскрыть закономерности атомно-молекулярной архитектуры и электронной структуры молекулярного и супрамолекулярного уровня организации вещества;
- подготовить специалиста - химика, который, опираясь на основные концепции атомно-молекулярной архитектуры, электронной структуры химических соединений и супрамолекулярной химии сможет объяснить механизм супрамолекулярных каталитических реакций.

Требования к результатам освоения дисциплины: Процесс изучения дисциплины «Супрамолекулярная химия» направлен на формирование элементов следующих компетенций в соответствии с ФГОС ВО РФ направления подготовки 04.04.01 Химия и основной образовательной программы высшего профессионального образования направления подготовки 04.04.01 Химия (магистерская программа: химия):

универсальные компетенции:

- способность осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, вырабатывать стратегию действий (УК-1);
- способность управлять проектом на всех этапах его жизненного цикла (УК-2);
- способность организовывать и руководить работой команды, вырабатывая командную стратегию для достижения поставленной цели (УК-3);
- способность применять современные коммуникативные технологии, в том числе на иностранных языках, для академического и профессионального взаимодействия (УК-4);
- способность анализировать и учитывать разнообразие культур в процессе межкультурного взаимодействия (УК-5);
- способность определять и реализовывать приоритеты собственной деятельности и способы ее совершенствования на основе самооценки (УК-6).

общепрофессиональные компетенции:

- способность выполнять комплексные экспериментальные и расчетно-теоретические исследования в избранной области химии или смежных наук с использованием современных приборов, программного обеспечения и баз данных профессионального назначения (ОПК-1);
- способность анализировать, интерпретировать и обобщать результаты экспериментальных и расчетно-теоретических работ в избранной области химии или смежных наук (ОПК-2);
- способность использовать вычислительные методы и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности (ОПК-3);
- способность готовить публикации, участвовать в профессиональных дискуссиях, представлять результаты профессиональной деятельности в виде научных и научно-популярных докладов (ОПК-4).

профессиональные компетенции, соответствующие виду (видам) профессиональной деятельности, на которые ориентирована программа магистратуры:

научно-исследовательская деятельность:

- способностью проводить научные исследования по сформулированной тематике, самостоятельно составлять план исследования и получать новые научные и прикладные результаты (ПК-1);
- владением теорией и навыками практической работы в избранной области химии (ПК-2);
- готовностью использовать современную аппаратуру при проведении научных исследований (ПК-3);
- способностью участвовать в научных дискуссиях и представлять полученные в исследованиях результаты в виде отчетов и научных публикаций (стендовые доклады, рефераты и статьи в периодической научной печати) (ПК-4);

организационно-управленческая деятельность:

- владением навыками составления планов, программ, проектов и других директивных документов (ПК-5);
 - способностью определять и анализировать проблемы, планировать стратегию их решения, брать на себя ответственность за результат деятельности (ПК-6);
- научно-педагогическая деятельность:*
- владением методами отбора материала, преподавания и основами управления процессом обучения в образовательных организациях высшего образования (ПК-7).

В результате изучения учебной дисциплины студент должен:

знать:

- основные концепции супрамолекулярной химии;
- основные понятия атомно-молекулярной архитектуры супрамолекулярных химических соединений.
- ключевые концепции структурной супрамолекулярной химии;
- закономерности связи электронного строения супрамолекулярных химических соединений с их свойствами и реакционной способностью.

уметь:

- получать структурно-химическую информацию супрамолекулярных объектов методами молекулярного моделирования;
- определить равновесную структуру объектов супрамолекулярной химии;
- провести конформационный анализ;
- рассчитать энергию ионизации в орбитальном, вертикальном и адиабатическом приближении;
- рассчитать энергию образования супрамолекулярных химических соединений.
- рассчитать дипольные моменты и использовать их для обоснования результатов конформационного анализа;
- анализировать полученные результаты, опираясь на знания концепций структурной супрамолекулярной химии;
- использовать программы структурной химии для решения химических задач;
- осуществить поиск необходимых физико-химических данных в электронных источниках научной химической информации;
- применять свои знания на практике и владеть навыками работы с современными компьютерными технологиями структурной химии;
- творчески подходить к решению задачи;
- проводить поиск структурной информации в современных электронных ресурсах;
- провести и обосновать выбор метода структурной химии, который необходим для решения поставленной задачи;
- ориентироваться в круге основных проблем современной структурной супрамолекулярной химии.

владеть:

- применения основных методологий структурной химии для анализа свойств супрамолекулярных химических соединений.
- навыками применения основных методологий современных компьютерных технологий квантовой химии;
- навыками совершенствования и развития своего научного потенциала.

4. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ И ФОРМЫ ОРГАНИЗАЦИИ УЧЕБНОГО ПРОЦЕССА

Порядковый номер и наименование темы	Краткое содержание темы
Содержательный модуль 1	
Тема 1. Супрамолекулярная химия: возникновение, развитие, перспективы.	Предмет и объекты супрамолекулярной химии. Исследования, заложившие основы супрамолекулярной химии. История изучения некоторых типичных объектов супрамолекулярной химии. Ключевая концепция супрамолекулярной химии. Супрамолекулярные соединения. Супрамолекулярные ансамбли. Необходимые предпосылки появления супрамолекулярной химии. Эндо- и экзомолекулярные макроциклические химические соединения. Структурная деформация краун-эфиров, криптанов, сферанов и поданов в реакциях образования супрамолекулярных соединений.
Тема 2. Молекулярное распознавание реагентов в реакциях образования супрамолекулярных соединений.	Молекулярное распознавание реагентов в супрамолекулярных реакциях. Выбор реагентов химической реакции. Молекулярная информация реагентов. Кинетически стабильные супрамолекулярные комплексы. Кинетическая лабильность супрамолекулярных комплексов. Термодинамическая стабильность супрамолекулярных комплексов. Молекулярный докинг реагентов на уровне их взаимодействий. Хелатный эффект в процессе молекулярного распознавания реагентов. Макроциклический эффект в процессе молекулярного распознавания реагентов. Темплатный эффект. Кинетический темплатный эффект. Термодинамический темплатный эффект.
Тема 3. Комплементарность молекулярной информации реагентов на уровне их взаимодействия.	Комплементарность зарядовой молекулярной информации реагентов на уровне их взаимодействия. Кинетически инертные супрамолекулярные комплексы. Комплементарность орбитальной молекулярной информации реагентов на уровне их взаимодействия. Комплементарность стереохимической молекулярной информации реагентов на уровне их взаимодействия. Принцип двойной комплементарности молекулярной информации реагентов на уровне их взаимодействия. Динамическая комплементарность молекулярной информации реагентов на уровне их взаимодействия. Молекулярная самосборка. Супрамолекулярная самосборка. Спонтанная ассоциация. Самоорганизация. Нековалентная репликация, процесс саморепликации. Кинетическая лабильность нековалентных связей. Алостерические эффекты. Алостерические конформационные изменения. Положительная кооперативность. Последовательная и регулируемая эффекторами самосборка. Запрограммированные супрамолекулярные системы.

<p>Тема 4. Супрамолекулярные взаимодействия.</p>	<p>Асоциаты янус-молекул. Н-связь.. Диполь-дипольные ориентационные взаимодействия реактантов. Потенциал Джинса. Диполь-квадрупольные ориентационные взаимодействия реактантов. Индуцированный диполь. Индукционные взаимодействия реактантов. Мгновенный диполь. Дисперсионные диполь-дипольные взаимодействия реактантов. Уравнение Лондона. Дисперсионные диполь-квадрупольные взаимодействия реактантов. Потенциал диполь-квадрупольных дисперсионных взаимодействий реактантов. Дисперсионные квадруполь-квадрупольные взаимодействия реактантов и потенциал этих взаимодействий. Ион-дипольные взаимодействия реактантов. Стекинг-взаимодействия реактантов. Гидрофобные взаимодействия.</p>
<p>Тема 5. Супрамолекулярный механизм химических реакций</p>	<p>Супрамолекулярные реакции. Супрамолекулярные каталитические реакции. Химическая активация реактантов супрамолекулярных реакций. Источник энергии для химической активации субстрата. Основные этапы химической активации реактантов супрамолекулярных реакций. Постулат Генри о механизме ферментативных реакций. Постулат Альфреда Вернера о механизме ферментативных реакций. Постулат Эмиля Фишера о механизме ферментативных реакций. Постулат Пауля Эрлиха о механизме ферментативных реакций. Постулат Дениела Кошланда о механизме ферментативных реакций. Кинетическая стабильность интермедиатов супрамолекулярных реакций. Термодинамическая стабильность интермедиатов супрамолекулярных реакций.</p>
<p>Тема 6. Супрамолекулярный катализ.</p>	<p>Биомиметический подход к разработке супрамолекулярных каталитических систем. Супрамолекулярные каталитические системы со связыванием катализатора. Супрамолекулярные каталитические системы со связыванием субстрата. Супрамолекулярный каталитический микрореактор. Кинетическая схема супрамолекулярной каталитической реакции. Кинетические параметры супрамолекулярной каталитической реакции.</p>
<p>Тема 7. Актуальные направления супрамолекулярной химии.</p>	<p>Молекулярные и супрамолекулярные устройства и машины. Ротаксаны. Катенаны. Супрамолекулярная инженерия. Молекулярные ключи. Супрамолекулярные холодильники. Супрамолекулярная химия полимеров. Супрамолекулярные материалы. Супрамолекулярная нанохимия. Супрамолекулярная фотохимия. Супрамолекулярная электрохимия. Супрамолекулярная хемионика. Супрамолекулярная семиохимия.</p>

Тематический план

Содержательный модуль 1						
Названия содержательных модулей и тем	Количество часов					
	Очная форма обучения					
	всего	в т.ч.				
		лекции	практические	лабораторные	самостоятель- ная работа	индивидуаль- ная работа
Тема 1. Супрамолекулярная химия: возникнове- ние, развитие, перспективы.	16	2		2	12	
Тема 2. Молекулярное распознавание реак- тантов в реакциях образования супра- молекулярных соединений.	16	2		2	12	
Тема 3. Комплементарность молекулярной информации реактантов на уровне их взаимодействия.	16	2		2	12	
Тема 4. Супрамолекулярные взаимодействия.	16	2		2	12	
Тема 5. Супрамолекулярный механизм хими- ческих реакций	16	2		2	12	
Тема 6. Супрамолекулярный катализ.	15	2		2	11	
Тема 7. Актуальные направления супрамоле- кулярной химии.	13	2		2	9	
Итого <i>по содержательному модулю 1</i>	108	14		14	80	

5. МЕТОДИЧЕСКИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ЛЕКЦИОННЫХ, ПРАКТИЧЕСКИХ И ЛАБОРАТОРНЫХ ЗАНЯТИЙ

Практические занятия не предусмотрены учебным планом

ТЕМЫ ЛЕКЦИОННЫХ ЗАНЯТИЙ

№ п/п	Название темы	Количество часов
1.	Супрамолекулярная химия: возникновение, развитие, перспективы.	2
2.	Молекулярное распознавание реактантов в реакциях образования супрамолекулярных соединений.	2
3.	Комплементарность молекулярной информации реактантов на уровне	2

	их взаимодействия.	
4.	Супрамолекулярные взаимодействия.	2
5.	Супрамолекулярный механизм химических реакций	2
6.	Супрамолекулярный катализ.	2
7.	Актуальные направления супрамолекулярной химии.	2
	ВСЕГО	14

ТЕМЫ ЛАБОРАТОРНЫХ ЗАНЯТИЙ

№ п/п	Название темы	Количество часов
1.	Динамическая комплементарность супрамолекулярных соединений.	2
2.	Структура и термодинамика образования комплексов криптанов с ионами металлов	2
3.	Молекулярное моделирование структуры сферандов и их металло-комплексов	2
4.	Молекулярное распознавание при образовании супрамолекулярных комплексов пероксидов	2
5.	Молекулярный докинг системы органический пероксид – галогенид тетраалкиламмония	2
6.	Прогнозирование реакционной способности супрамолекулярных комплексов органических пероксидов	2
7.	Молекулярный дизайн предорганизованных молекулярных систем	2
	ВСЕГО	14

6. МЕТОДИЧЕСКИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ ПО ОРГАНИЗАЦИИ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ СТУДЕНТОВ.

ОРГАНИЗАЦИЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ СТУДЕНТОВ

№ п/п	Название темы	Количество часов
1.	Супрамолекулярная химия: возникновение, развитие, перспективы.	6
	Индивидуальная работа (п. 1).	6
2.	Молекулярное распознавание реагентов в реакциях образования супрамолекулярных соединений.	6
	Индивидуальная работа (п. 2).	6
3.	Комплементарность молекулярной информации реагентов на уровне их взаимодействия.	6
	Индивидуальная работа (п. 3).	6
4.	Супрамолекулярные взаимодействия.	6
	Индивидуальная работа (п. 4).	6
5.	Супрамолекулярный механизм химических реакций	6
	Индивидуальная работа (п. 1 и п. 5).	6

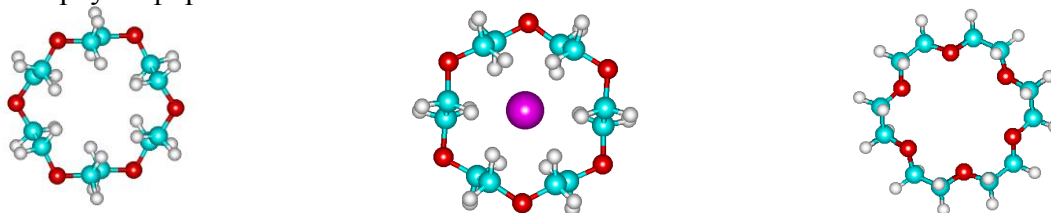
6.	Супрамолекулярный катализ.	6
	Индивидуальная работа (п. 5).	5
7.	Супрамолекулярные машины.	4
	Супрамолекулярная семиохимия.	5
	ВСЕГО	80

7. ИНДИВИДУАЛЬНЫЕ ЗАДАНИЯ

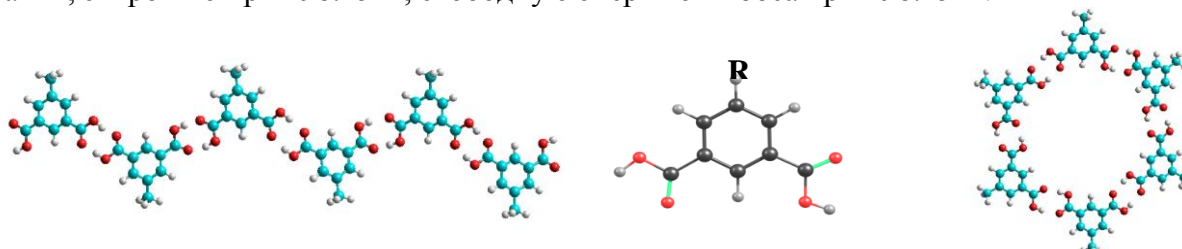
Индивидуальная работа

Цель: овладеть теорией и практикой молекулярного моделирования объектов супрамолекулярной химии.

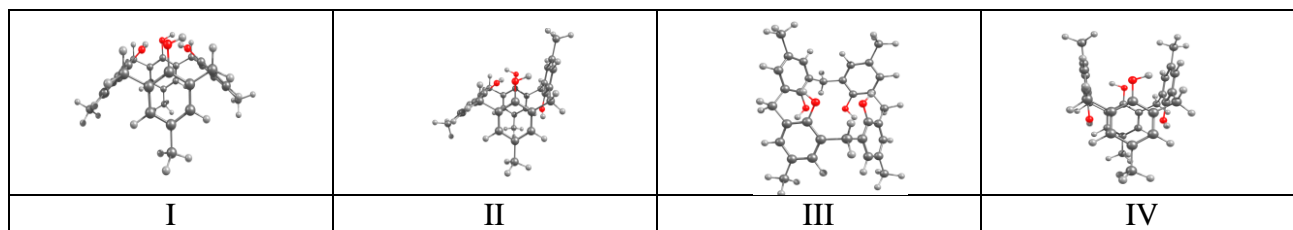
1. Получить молекулярную модель эндо-конформации макроциклического эфира 18-краун-6. Для построения 2D-эскиза и 3D-модели соединения использовать программный комплекс HyperChem. Провести оптимизацию молекулярной геометрии объекта средствами программного комплекса HyperChem. Метод расчета – молекулярная механика, силовое поле - ММ+. Получить структурную модель конформации краун-эфира, которую принимает соединение в комплексе с ионом калия. Рассчитать разность энергий эндо- и экзо- конформаций краун-эфира. Рассчитать величину теплоты комплексообразования ($\Delta H_{\text{комп}}$) при образовании комплекса краун-эфира и иона калия.



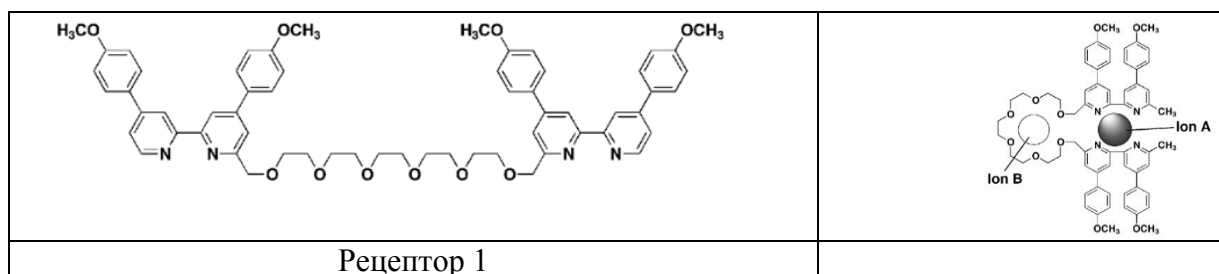
2. Построить супрамолекулярные наночастицы янус-молекул – изомеров R-фталевой кислоты. Провести квантово-химический расчет полученных супрамолекулярных наночастиц и соответствующих конформеров R-фталевой кислоты одним из методов полуэмпирической квантовой химии в режиме оптимизации молекулярной геометрии при 298.15 К. Определить для каждого объекта работы: энергию при 0 К и при 298.15 К, стандартную энтальпию образования, энтропию при 298.15 К, свободную энергию Гиббса при 298.15 К.



3. Получить равновесные конфигурации *para*-R-каликс[4]арена, которые соответствуют конформерам I - IV, в приближении методов полуэмпирической квантовой химии. Выполнить расчет энтальпии образования и свободной энергии Гиббса образования в приближении метода AM1 для I – IV конформеров *para*-R-каликс[4]арена при 298 К. Определить наиболее стабильный конформер *para*-R-каликс[4]арена. Определить параметры конформационного равновесия *para*-R-каликс[4]арена.



4. Получить 3D модель дитопного рецептора 1. Выполнить оптимизацию молекулярной геометрии объекта методами ММ+ и РМ3. Рассчитать полную энергию молекулы и энтальпию образования в рамках метода РМ3. Визуализировать поверхность молекулярного электростатического потенциала, выявить области структуры молекулы, способные связывать катионы металлов. Получить 3D модель комплекса рецептора 1 с двумя катионами (ион А – Zn^{2+} , ион В – Li^{+}). Выполнить оптимизацию молекулярной геометрии объекта методами ММ+ и РМ3. Рассчитать полную энергию комплекса и энтальпию образования в рамках метода РМ3. Рассчитать тепловой эффект реакции образования комплекса.



5. Обосновать принцип двойной комплементарности молекулярной информации в процессе молекулярного распознавания реагентов супрамолекулярных реакций.

8. КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ К ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ.

1. Супрамолекулярные соединения.
2. Супрамолекулярная химия.
3. Концепция супрамолекулярного механизма химических реакций.
4. Супрамолекулярные реакции.
5. Супрамолекулярные каталитические реакции.
6. Химическая активация реагентов супрамолекулярных реакций.
7. Основные этапы химической активации реагентов супрамолекулярных реакций.
8. Постулат Генри о механизме ферментативных реакций.
9. Постулат Альфреда Вернера о механизме ферментативных реакций.
10. Постулат Эмиля Фишера о механизме ферментативных реакций.

9. ОБРАЗЕЦ ВАРИАНТА МОДУЛЬНОГО КОНТРОЛЯ И КРИТЕРИЙ ОЦЕНИВАНИЯ

ГОУ ВПО «ДОНЕЦКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ» Химический факультет

Направление подготовки:	04.04.01 Химия
Магистерская программа:	химия
Программа подготовки	академическая магистратура
Семестр	2
Учебная дисциплина	Супрамолекулярная химия

МОДУЛЬНАЯ КОНТРОЛЬНАЯ РАБОТА ВАРИАНТ №1

1. Концепция супрамолекулярного механизма химических реакций.
2. Супрамолекулярные каталитические реакции.
3. Химическая активация реагентов супрамолекулярных реакций.

Утверждено на заседании кафедры физической химии,
протокол № ____ от « ____ » _____ 20 ____ г.

Зав. кафедрой _____
Преподаватель _____

Критерии оценивания модульного контроля

Номер задания	Количество баллов
Задание 1	10
Задание 2	10
Задание 3	10
Всего	30

9. ОБРАЗЕЦ ЭКЗАМЕНАЦИОННОГО БИЛЕТА

(теоретические вопросы к экзамену, образец билета и критерии оценивания)

Теоретические вопросы к экзамену

1. Супрамолекулярные соединения.
2. Супрамолекулярная химия.
3. Концепция супрамолекулярного механизма химических реакций.
4. Супрамолекулярные реакции.
5. Супрамолекулярные каталитические реакции.
6. Химическая активация реагентов супрамолекулярных реакций.
7. Основные этапы химической активации реагентов супрамолекулярных реакций.
8. Постулат Генри о механизме ферментативных реакций.
9. Постулат Альфреда Вернера о механизме ферментативных реакций.
10. Постулат Эмиля Фишера о механизме ферментативных реакций.
11. Постулат Альфреда Эрлиха о механизме ферментативных реакций.
12. Постулат Дениела Кошланда о механизме ферментативных реакций.
13. Ключевая концепция супрамолекулярной химии.
14. Необходимые предпосылки появления супрамолекулярной химии.
15. Молекулярное распознавание реагентов в супрамолекулярных реакциях.
16. Молекулярная информация реагентов.
17. Комплементарность молекулярной информации реагентов на уровне их взаимодействия.
18. Комплементарность зарядовой молекулярной информации реагентов на уровне их взаимодействия.
19. Кинетически стабильные супрамолекулярные комплексы.
20. Кинетически инертные супрамолекулярные комплексы.

21. Кинетическая лабильность супрамолекулярных комплексов.
22. Термодинамическая стабильность супрамолекулярных комплексов.
23. Комплементарность орбитальной молекулярной информации реагентов на уровне их взаимодействия
24. Комплементарность стереохимической молекулярной информации реагентов на уровне их взаимодействия.
25. Принцип двойной комплементарности молекулярной информации реагентов на уровне их взаимодействия.
26. Динамическая комплементарность молекулярной информации реагентов реагентов на уровне их взаимодействия.
27. Молекулярный докинг реагентов на уровне их взаимодействия.
28. Хелатный эффект в процессе молекулярного распознавания реагентов.
29. Макроциклический эффект в процессе молекулярного распознавания реагентов
30. Темплатный эффект.
31. Кинетический темплатный эффект.
32. Термодинамический темплатный эффект.
33. Кинетическая селективность супрамолекулярных реакций.
34. Термодинамическая селективность супрамолекулярных реакций
35. Синтоны супрамолекулярных соединений и их энергетика.
36. Водородная связь.
37. Ассоциаты янус-молекул.
38. Энергия Н - связи
39. Длина Н - связи
40. Условие Гамильтона - Айберса для Н-ассоциатов.
41. Изменение длины -Х-Н...связи в Н- ассоциатах.
42. Конфигурация фрагменту $\sim X - H \dots Y \sim$ в Н- асоциатах
43. Изменение заряда на мостиковом атоме водорода в Н- ассоциатах
44. ИК- спектроскопия Н- ассоциатов.
45. Профили ППЭ Н – ассоциатов.
46. ЯМР-спектроскопия Н- ассоциатов.
47. Дипольный момент Н- ассоциатов.
48. Преобладающий тип взаимодействия и направленность Н – связи.
49. Орбитально-электростатическая концепция Н - связи.
50. Энергия Н - связи

ГОУ ВПО «ДОНЕЦКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
Химический факультет

Направление подготовки:	04.04.01 Химия
Магистерская программа:	химия
Программа подготовки	академическая магистратура
Семестр	3
Учебная дисциплина	Супрамолекулярная химия

БИЛЕТ №1

1. Кинетическая селективность супрамолекулярных реакций.
2. Термодинамическая селективность супрамолекулярных реакций

3. Синтоны супрамолекулярных соединений и их энергетика.
 4. Принцип двойной комплементарности молекулярной информации реагентов на уровне их взаимодействия.

Утверждено на заседании кафедры физической химии.

Протокол № ____ от «__» _____ 20__ года

Заведующий кафедрой _____

Экзаменатор _____

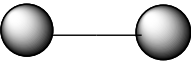

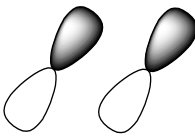
Критерии оценивания экзамена

Номер задания	Количество баллов
Задание 1	25
Задание 2	25
Задание 3	25
Задание 4	25
Всего	100

11. ОБРАЗЕЦ ТЕСТОВОГО ЗАДАНИЯ

В приведенных тестах укажите правильный ответ (правильных вариантов ответа один или несколько).

1.	Проанализировать структуру МО (ψ_1) $\psi_1 = \dots + c_{11}\phi_{S(A)} + c_{12}\phi_{S(B)} + \dots$ и определить тип вклада в образование химической связи s – АО, которые центрированы на атомах А и В. а. связывающий вклад; б. антивывающий вклад. в. несвязывающий вклад.	
2.	Проанализировать структуру МО (ψ_2) $\psi_2 = \dots - c_{21}\phi_{P_x(A)} + c_{22}\phi_{P_x(B)} + \dots$ и определить тип вклада в образование σ -химической связи p – АО, которые центрированы на атомах А и В. а. связывающий вклад; б. антивывающий вклад; в. несвязывающий вклад.	
3.	Проанализировать структуру МО (ψ_2) $\psi_2 = \dots - c_{21}\phi_{P_x(A)} + c_{22}\phi_{P_x(B)} + \dots$ и определить тип вклада p – АО, которые центрированы на атомах А и В, в образование π -химической связи. а. связывающий вклад; б. антивывающий вклад; в. Несвязывающий вклад.	

4.	<p>Проанализировать структуру МО (ψ_1)</p> $\psi_1 = \dots + c_{11}\varphi_{s(A)} + c_{12}\varphi_{p_x(B)} + \dots$ <p>и определить тип вклада s и p – АО, которые центрированы на атомах А и В, в образование химической связи.</p> <p>а. связывающий вклад; б. антисвязывающий вклад; в. несвязывающий вклад.</p>	
5.	<p>S АО центрированы на атомах А и В и образуют ... комбинацию.</p>  <p>Выбрать компоненты $c_{21}\varphi_{s(A)}$ и $c_{22}\varphi_{s(B)}$ МО контролирующей эту химическую связь:</p> $\Psi_2 = \dots c_{21}\varphi_{s(A)} \dots c_{22}\varphi_{s(B)} +$ <p>а. связывающую; б. антисвязывающую; в. несвязывающую. г. $-c_{21}\varphi_{s(A)}$; д. $+c_{21}\varphi_{s(A)}$; е. $-c_{22}\varphi_{s(B)}$; ж. $+c_{22}\varphi_{s(B)}$.</p>	
6.	<p>p_x и S АО центрированы на атомах А и В и образуют ... комбинацию</p>  <p>Выбрать компоненты $c_{21}\varphi_{p_x(A)}$ и $c_{22}\varphi_{p_x(B)}$ МО контролирующей эту химическую связь:</p> $\Psi_2 = \dots c_{21}\varphi_{p_x(A)} \dots c_{22}\varphi_{s(B)} +$ <p>а. связывающую; б. антисвязывающую; в. несвязывающую. г. $-c_{21}\varphi_{p_x(A)}$; д. $+c_{21}\varphi_{p_x(A)}$; е. $-c_{22}\varphi_{s(B)}$; ж. $+c_{22}\varphi_{s(B)}$.</p>	
7.	<p>p_z АО центрированы на атомах А и В и образуют ... π-комбинацию</p>  <p>Выбрать компоненты $c_{21}\varphi_{p_z(A)}$ и $c_{22}\varphi_{p_z(B)}$ МО контролирующей эту химическую связь:</p> $\Psi_2 = \dots c_{21}\varphi_{p_z(A)} \dots c_{22}\varphi_{p_z(B)} +$ <p>а. связывающую; б. антисвязывающую;</p>	

	В. несвязывающую. Г. $-C_{21}\Phi_{Pz(A)}$; Д. $+C_{21}\Phi_{Pz(A)}$; Е. $-C_{22}\Phi_{Pz(B)}$; Ж. $+C_{22}\Phi_{Pz(B)}$.	
--	---	--

12. КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ

По курсу предполагается проведение промежуточной аттестации в виде модульного контроля, и экзамена. Экзамен сдают студенты с целью повышения рейтинга.

Распределение баллов, которые могут получить студенты в процессе изучения дисциплины

Организационно учебная работа студента	СРС			Всего
	Индивидуальная работа	Модульный контроль	Индивидуальная творческая работа	
Max 50 баллов	max 10 баллов	max 40 баллов		100 баллов

Шкала соответствия баллов национальной шкале

Оценка по шкале ECTS	Оценка по 100-балльной шкале	Оценка по государственной шкале (экзамен, дифференцированный зачет)	Оценка по государственной шкале (зачет)
A	90-100	5 (отлично)	зачтено
B	80-89	4 (хорошо)	зачтено
C	75-79	4 (хорошо)	зачтено
D	70-74	3 (удовлетворительно)	зачтено
E	60-69	3 (удовлетворительно)	зачтено
FX	35-59	2 (неудовлетворительно) с возможностью повторной сдачи	не зачтено
F	0-34	2 (неудовлетворительно) с возможностью повторной сдачи при условии обязательного набора дополнительных баллов	не зачтено

13. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ УЧЕБНОГО ПРОЦЕССА

Лекционные занятия проводятся в аудитории, оснащенной мультимедийной техникой и доской. Лабораторные занятия проводятся в компьютерном классе, оборудованном компьютерами с лицензионным программным обеспечением, доступом к сети Интернет, столами, доской. Дополнительное обеспечение: Wi-Fi доступ в корпусах университета, текстовые и электронные ресурсы Научной библиотеки университета

14. РЕКОМЕНДОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

№	Наименование	Кол-во экземпляров в библиотеке ДонНУ	Наличие электронной версии в ЭБС
Основная			
1.	Стид, Д. В. Супрамолекулярная химия [Текст] : в 2 т. Т. 1 / Д. В. Стид, Д. Л. Этвуд ; пер. с англ. И. Г. Варшавской и др. ; под ред. А.Ю. Цивадзе и др. - М.: Академкнига, 2007. - 479 с.	40	
2.	Стид, Д. В. Супрамолекулярная химия [Текст] : в 2 т. Т. 2 / Д. В. Стид, Д. Л. Этвуд ; пер. с англ. И. Г. Варшавской и др. ; под ред. А.Ю. Цивадзе и др. - М.: Академкнига, 2007. - 485 с.	40	
3.	Туровский Н.А. Практикум компьютерной структурной химии: учебное пособие /Н.А.Туровский. – Донецк: ГОУ ВПО «ДонНУ», 2018. – 145 с	10	+
4.	Туровский Н.А. Практикум компьютерной структурной химии[Электронный ресурс]: учебное пособие /Н.А.Туровский. – Донецк: ГОУ ВПО «ДонНУ», 2018. – 145 с	Электронный ресурс	+
Дополнительная			
5.	Supramolecular reaction of lauroylperoxide with tetraalkylammonium Bromides /N.A. Turovskij at. al. // Oxidation Communications. – 2010. – Vol. 33, № 3. – P. 485-501. http://repo.donnu.ru:8080/jspui/handle/123456789/4318	Электронный ресурс	+
6.	Supramolecular Decomposition of the Aalkyl Hydroperoxides in the Presence of Et4NBr [Электронныйресурс] / N. A. Turovskij at al. // Polymer Products and Chemical Processes: Techniques, Analysis and Applications / ed. Richard A. Pethrick, Eli M. Pearce, Gennady E. Zaikov. –Toronto ; New Jersey : Apple Academic Press Inc., 2014. –Sect. II :SpecialTopics. – P. 270-285. – Электрон. текстовые дан. – Режим доступа: http://repo.donnu.ru:8080/jspui/handle/123456789/4324	Электронный ресурс	+

15. ИНФОРМАЦИОННЫЕ РЕСУРСЫ

<http://mondnr.ru/> – Министерство образования и науки Донецкой Народной Республики
<http://resobrnadzor.ru/> – Республиканская служба по контролю и надзору в сфере образования и науки.

16. ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ

1. Windows 7 PRO(корпоративная лицензия ДОННУ, лицензия №46484614);
2. WindowsOffice (корпоративная лицензия ДОННУ, лицензия №46472919);
3. MicrosoftVisualStudio (лицензияпрограммы DreamSpark для высших учебных заведений);

Рабочая программа рассмотрена и переутверждена на заседании кафедры физической химии с изменениями (без изменений) на _____ год.

Протокол № от «» _____ г.

Заведующий кафедрой _____

В.М. Михальчук