

КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА
ХІМІЧНИЙ ФАКУЛЬТЕТ

«ЗАТВЕРДЖУЮ»

Заступник декана
з навчальної роботи



Наталія УСЕНКО

« 11 » 06 2024 року

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

СУПРАМОЛЕКУЛЯРНА ХІМІЯ

для здобувачів освіти

галузь знань	10 Природничі науки
спеціальність	102 Хімія
освітній рівень	магістр
освітня програма	Хімія
вид дисципліни	нормативна

Форма навчання	заочна
Навчальний рік	2024/2025
Семестр	<u>1</u>
Кількість кредитів ECTS	<u>5</u>
Мова викладання, навчання та оцінювання	українська
Форма заключного контролю	іспит

Викладачі:

д.хім.н, професор Пивоваренко В.Г.,

к.хім.н, доцент Куліченко О.С.

Пролонговано: на 20__/20__ н. р. _____ (_____) «__» _____ 20__ р.

на 20__/20__ н. р. _____ (_____) «__» _____ 20__ р.

КИЇВ – 2024

Розробники:

Пивоваренко Василь Георгійович, д.х.н., професор кафедри органічної хімії

Куліченко Сергій Анатолійович, к.х.н., доцент, доцент кафедри аналітичної хімії.

ЗАТВЕРДЖЕНО:

Завідувач кафедри органічної хімії

 Олександр ГРИГОРЕНКО

Протокол № 15 від « » March 2024 р.

ЗАТВЕРДЖЕНО:

Завідувач кафедри аналітичної хімії

 Оксана ТАНАНАЙКО

Протокол № 8 від «28» 03 2024 р.

Схвалено науково-методичною комісією хімічного факультету

Протокол від «9» квітня 2024 року № 8

Голова науково-методичної комісії  Олександр ПОЇК

«9» квітня 2024 року

1. Мета дисципліни ознайомлення студентів із особливостями просторової будови і властивостей супермолекул, класифікацією супрамолекулярних комплексів, теорією та практикою молекулярного розпізнавання та детекції супрамолекулярних взаємодій; вивчення складу, властивостей, специфіки будови організованих середовищ та систем на основі дифільних молекул, явища та природи солубілізації, перебігу кислотно-основних та рівноваг асоціації у таких системах, прояву в них ефектів вибіркового зв'язування субстрату по типу «гість-хазяїн».

2. Попередні вимоги до опанування навчальної дисципліни:

1. Знати основи загальної та неорганічної хімії.

2. Знати основи аналітичної хімії

3. Знати основи органічної хімії

4. Володіти комп'ютерними програмами, пов'язаними із обробкою та представленням результатів досліджень супрамолекулярних комплексів.

5. Володіти навиками пошуку необхідної інформації в науковій літературі, наукометричних базах та інтернет-просторі.

3. Анотація навчальної дисципліни. Призначена для вивчення студентами природи міжмолекулярних взаємодій та особливостей просторової будови і властивостей супермолекул. Ознайомлення з класами супрамолекулярних структур, теорією та практикою молекулярного розпізнавання та детекції супрамолекулярних взаємодій; методами вивчення складу, властивостей, специфіки просторової будови організованих середовищ та систем на основі дифільних молекул, явища та природи солубілізації, перебігу кислотно-основних та рівноваг асоціації у таких системах, прояву в них ефектів вибіркового зв'язування субстрату за типом «гість-хазяїн».

4. Завдання: розвиток теоретичних уявлень студентів про будову та закономірності взаємодії великих молекул, їх поведінку і властивості в організованих системах та набуття студентами навичок у вивченні супрамолекулярних взаємодій.

Згідно з вимогами Стандарту вищої освіти України (другий (магістерський) рівень вищої освіти (сьомий рівень НРК України), галузь знань 10 «Природничі науки», спеціальність 102 «Хімія») дисципліна забезпечує набуття студентами таких компетентностей:

інтегральної:

Здатність розв'язувати складні задачі і проблеми у галузі хімії або у процесі навчання, що передбачає проведення досліджень та/або здійснення інновацій та характеризується невизначеністю умов і вимог.

Загальних:

ЗК1. Знання та розуміння предметної області та розуміння професійної діяльності.

ЗК3. Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу

ЗК 8. Здатність оцінювати та забезпечувати якість виконуваних робіт

ЗК.12 Здатність працювати автономно

ЗК 13. Здатність до активного збереження довкілля.

Фахових:

ФК 5. Здатність застосовувати методи комп'ютерного моделювання для вирішення наукових, хіміко-технологічних проблем та проблем хімічного матеріалознавства.

ФК 7. Здатність дотримуватися етичних стандартів досліджень і професійної діяльності в галузі хімії (академічна доброчесність, ризики для людей і довкілля тощо).

5. Результати навчання за дисципліною

Код	Результат навчання (1 - знати; 2 - вміти; 3 - комунікація; 4 - автономність та відповідальність)	Форми (та/або методи (технології) викладання навчання)	Методи оцінювання (поточний контроль (активність під час занять та виконання дом. роботи ПтК1, написання КР ПтК-2), підсумковий контроль ПсК)	Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни
1.1	Знати місце курсу «Супрамолекулярна хімія» в системі сучасної хімічної науки	лекції, практичні, самостійні	ПтК-2, ПтК-3, ПсК	5
1.2	Знати природу та силу міжмолекулярних взаємодій	лекції, практичні, самостійні	ПтК-2, ПтК-3, ПсК	10
1.3	Знати вплив просторової та хімічної комплементарності на енергетику міжмолекулярних взаємодій	лекції, практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-3, ПсК	25
2.1	Уміти аналізувати просторову будову молекулярних комплексів	практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПтК-3, ПсК	10
2.2	Уміти розраховувати міцність молекулярних комплексів	практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПтК-3, ПсК	15
2.3	Уміти аналізувати конформаційну обмеженість складних молекул	лекції, практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПтК-3, ПсК	15
3.1	Здатність використовувати сучасні інформаційно-комунікаційні технології при спілкуванні, а також у зборі, аналізі, обробці та інтерпретації даних, отриманих у ході виконання практичних завдань	лекції, практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПтК-3, ПсК	5
3.2	Здатність виконувати передбачені навчальною програмою завдання та операції у співпраці з іншими виконавцями	практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-3, ПсК	5
4.1	Уміти самостійно реєструвати, пояснити та відтворити результати експерименту	практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-3, ПсК	5
4.2	Дотримуватися правил техніки безпеки при роботі в хімічній лабораторії	практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-3, ПсК	5

6. Співвідношення результатів навчання дисципліни з програмними результатами навчання

ПРП	РНД (код)												
	1.1	1.2	1.3	2.1	2.2	2.3	3.1	3.2	4.1	4.2			
ПРН1. Знати та розуміти наукові концепції та сучасні теорії хімії, а також фундаментальні основи суміжних наук.	+	+	+	+									
ПРН2. Глибоко розуміти основні факти, концепції, принципи і теорії, що стосуються предметної області, опанованої у ході магістерської програми, використовувати їх для розв'язання складних задач і проблем, а також проведення досліджень з відповідного напрямку хімії.	+	+	+										
ПРН3. Застосовувати отримані знання і розуміння для вирішення нових якісних та кількісних задач хімії	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+
ПРН5. Володіти методами комп'ютерного моделювання структури, параметрів і динаміки хімічних систем											+	+	
ПРН8. Вміти ясно і однозначно донести результати власного дослідження до фахової аудиторії та нефхівців.											+	+	

7.1. Форми оцінювання студентів:

Семестрове оцінювання:

Максимальна/мінімальна кількість балів, які можуть бути отримаю студентом: **60 балів /**

36 балів, а саме:

1. Усна відповідь (колоквіум) під час практичного заняття: **10 балів/ 6 балів;**
2. Активність під час практичних занять: **10 балів/ 6 балів;**
3. Виконання домашньої самостійної роботи: **10 балів/ 6 балів;**
4. написання контрольної роботи та підсумкової контрольної роботи - **30 балів/ 18 балів.**

Підсумкове оцінювання (у формі іспиту):

Максимальна/мінімальна кількість балів, які можуть бути отримані студентом: **40 балів /**

24 бали.

Результати навчання які будуть оцінюватись: РН 1.1, 1.2, 1.3, 2.1, 2.3, 3.1, 3.2, 4.1, 4.2. Форма проведення: письмова робота. .

Для отримання загальної позитивної оцінки з дисципліни оцінка за іспит не може бути меншою 24 балів.

Здобувач освіти допускається до іспиту, якщо протягом семестру він: набрав не менше, ніж 36 балів;
виконав усі види робіт з переліку семестрового оцінювання; написав передбачені планом контрольні роботи.

Організація оцінювання:

Терміни проведення оцінювання:

Оцінювання активності, практичних занять і самостійної роботи: впродовж семестру. Контрольна робота: не раніше 4 тижня семестру;

Шкала відповідності оцінок

Оцінка (за національною шкалою)/ National grade	Рівень досягнень / Marks
Відмінно / Excellent	90-100
Добре/ Good	75-89
Задовільно / Satisfactory	60-74
Незадовільно / Fail	0-59

8. Структура навчальної дисципліни. Тематичний план лекцій

№ лекції	Назва лекції	лекції	практичні заняття	самост. робота
ЧАСТИНА 1. ТЕОРЕТИЧНІ ОСНОВИ СУПРАМОЛЕКУЛЯРНОЇ ХІМІЇ				
1	Самостійна робота. Вступ. Принципи утворення супрамолекулярних структур. Предмет супрамолекулярної хімії. Історія становлення наукового напрямку. Основні принципи утворення супрамолекулярних комплексів: хімічна і просторова комплементарність у комплексі «гість-хазяїн», кооперативність взаємодій. Типи міжмолекулярних взаємодій, їх енергетичні характеристики та кооперативний вклад у випадку складних молекул. Комплементарність молекул за хімічною та просторовою будовою. Термодинамічна і кінетична складові селективності супрамолекулярних взаємодій. Вплив конформаційної обмеженості молекул на селективність міжмолекулярних взаємодій та стабільність утвореного комплексу. Приклади конформаційна обмежених гостей (нуклеїнові основи, стероїди, циклічні пептиди, алкалоїди, антибіотики, вітаміни, яди і токсини).			20
2	Самостійна робота. Приклади супрамолекулярних ансамблів на основі різних рецепторів. Хелатори, коронанди, поданди, криптанди, каліксарени, карцеранди, катенани, ротоксани, куркубітурили, дендримери. Природні супрамолекулярні структури на основі порфіринів. Конформація та реакційна здатність. Конформаційна обмеженість та структурна жорсткість молекул і супрамолекулярних комплексів, їх вплив на кінетику утворення та міцність супрамолекулярних комплексів. Конформація та ліпофільність молекули. Значення нековалентних взаємодій у біологічних процесах. Авідин-біотин та стрептавідин-біотинові комплекси.			20
3	Лекція. Детекція супрамолекулярних взаємодій.	2	4	10
4	Лекція. Сучасні уявлення про структуру води та сполук включення на її основі. Контрольна робота I	2	2	10
ЧАСТИНА 2. СУПРАМОЛЕКУЛЯРНА ХІМІЯ ОРГАНІЗОВАНИХ СЕРЕДОВИЩ				
5	Самостійна робота. Предмет та завдання супрамолекулярної хімії організованих середовищ. Історичні відомості: формування основних понять, ідей, мети та предмету супрамолекулярної хімії. Супрамолекулярна хімія і вирішення проблеми хімічної спорідненості та вибірковості взаємодій. «М'які» асоціати і організовані середовища як іманентні складові об'єктів супрамолекулярної хімії. Становлення супрамолекулярної хімії організованих середовищ. Основні типи організованих середовищ: розчини			20

	молекул-рецепторів, молекулярні ансамблі і мицелярні системи на основі дифільних органічних молекул. Природа, специфічні та загальні властивості мікрогетерогенних організованих середовищ.			
6	Лекція. Основні типи організованих середовищ та систем на основі дифільних органічних молекул.	2	4	10
7	Самостійна робота. Основні типи організованих середовищ та систем на основі дифільних органічних молекул. Поведінка дифільних органічних речовин у водних та неводних розчинах. Розчинність і фазова діаграма розчинів ПАР. Мицелоутворення у розчинах ПАР, критична концентрація мицелоутворення (ККМ), методи визначення, фактори впливу. Точка (температура) Крафта. Температура помутніння у розчинах неіонних та іонних ПАР. Поліморфізм мицел, їх природа та будова. Сукупність критичних концентрацій мицелоутворення. Сферичні, еліпсоїдальні, циліндричні та ламелярні мицели ПАР, везикули, ліпосоми, наносоми, рідкокристалічні фази ПАР. Прямі та обернені мицелярні структури. Організація розчинів високомолекулярних сполук (ВМС). Стан катіонних, аніонних та амфолітних ВМС у розчинах, ізоелектрична точка амфолітних ВМС.			20
8	Лекція. Солюбілізація в організованих середовищах. Кислотно-основні властивості солюбілізованих субстратів.	2	3	10
9	Лекція. Асоціація і комплексоутворення в організованих середовищах. Практичне застосування здобутків галузі в Україні та в світі. Підсумкова контрольна робота	2	4	20
	УСЬОГО	10	0	140

Загальний обсяг 150 год., в тому числі:

Лекції -10 год.

Практичні заняття- 0 год.

Самостійна робота - 140 год.

Консультації - 0 год.

9.Рекомендовані джерела

Основні:

1. Пивоваренко В.Г. Основи супрамолекулярної хімії. (Частина 1 рукопису) 2022. - 104 с.
<https://drive.google.com/drive/folders/1ABLG2YiwO0NvGDx-bOp6qWkRQ6u-sE> 14
2. Куліченко С.А., Дорошук В.О. Організовані середовища поверхнево-активних речовин в аналізі: навч. посіб. для студ. вищ. навч. закл. - К.: ВПЦ "Київський університет", 2010. - 108 с.
3. Ariga K., Kunitake T. Supramolecular Chemistry: Fundamentals and Applications. - Springer Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2006. - 208 p.

4. Steed J., Atwood J. Supramolecular Chemistry. Second ed. Vol. 1, 2. - Wiley, 2013. - 1056 p.

Додаткові:

1. Balzani V., Scandola F. Supramolecular photochemistry. Chichester: Ellis Horwood, 1991, 458 p.
2. Balzani V., Credi A., Venturi M. Molecular Devices and Machines. WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA Weinheim, 2003, 494 P.
3. Atwood J., Steed J. Encyclopedia Supramolecular Chemistry. Vol. 1, 2. CRC Press, 2004 - 1670 p.
4. T. Steiner. The Hydrogen Bond in the Solid State. Angew. Chem. Int. Ed. 2002, 41, 48-76
5. E.D. Glowacki, M. Irimia-Vladu, S. Bauer, N.S. Sariciftci. Hydrogen-bonds in molecular solids—from biological systems to organic electronics. *J. Mater. Chem. B*, 2013, 1, 3742-3753.
6. V. Russell, M. Scudder, I. Dance. The crystal supramolecularity of metal phenanthroline complexes. *J. Chem. Soc., Dalton Trans.*, 2001, 789-799.
7. M. Alonso, T. Woller, F.J. Martin-Martinez, J. Contreras-Garcia, P. Geerlings, F. De Proft. Understanding the Fundamental Role of n/n , cr/cr and cr/n Dispersion Interactions in Shaping Carbon-Based Materials. *Chem. Eur. J.*, 2014, 20, 4931-4941.
8. C. A. Hunter and J. K. M. Sanders. The Nature of $n - n$ Interactions. *J. Am. Chem. Soc.* 1990, 112, 5525-5534.
9. C. Janiak. A critical account on $n - n$ stacking in metal complexes with aromatic nitrogen-containing ligands. *J. Chem. Soc., Dalton Trans.*, 2000, 3885-3896
10. T. K. Mandal, S. Samanta, S. Chakraborty, A. Datta. An Interplay of Cooperativity between Cation.. n , Anion.. n and C-H.. Anion Interactions. *ChemPhysChem* 2013, 14, 1149 - 1154
11. E. T. Kool. HYDROGEN BONDING, BASE STACKING, AND STERIC EFFECTS IN DNA REPLICATION. *Ann. Rev. Biophys. Biomol. Struct.* 2001. 30:1-22.
12. R. Chakrabarty, P. S. Mukherjee, P. J. Stang. Supramolecular Coordination: Self-Assembly of Finite Two- and Three-Dimensional Ensembles. *Chem. Rev.* 2011, 111, 6810-6918.
13. S. Durot, J. Taesch, V. Heit. Multiporphyrinic Cages: Architectures and Functions. *Chem. Rev.*, 2014, 114 (17), pp 8542-8578.
14. H. Amouri, C. Desmarets, J. Moussa. Confined Nanospaces in Metallocages: Guest Molecules, Weakly Encapsulated Anions, and Catalyst Sequestration. *Chem. Rev.* 2012, 112, 2015-2041.
15. N. Ahmad, A. H. Chughtai, H. A. Younus, F. Verpoort. Discrete metal-carboxylate self-assembled cages: Design, synthesis and applications. *Coord. Chem. Rev.* 2014, 280, 1-27.
16. S. J. Dalgarno, N. P. Power, J. L. Atwood. Metallo-supramolecular capsules. *Coord. Chem. Rev.* 2008, 252, 825-841.
17. P. Jin, S. J. Dalgarno, J. L. Atwood. Mixed metal-organic nanocapsules. *Coord. Chem. Rev.* 2010, 254, 1760-1768.
18. P. Pallavicini, Y. A. Diaz-Fernandez, L. Pasotti. Micelles as nanosized containers for the self-assembly of multicomponent fluorescent sensors. *Coord. Chem. Rev.* 2009, 253, 2226-2240.
19. B. Ballesteros, T. B. Faust, C.-F. Lee, D. A. Leigh, C. A. Muryn, R. G. Pritchard, D. Schultz, S. J. Teat, G. A. Timco, R. E. P. Winpenny. Synthesis, Structure, and Dynamic Properties of Hybrid Organic-Inorganic Rotaxanes. *J. AM. CHEM. SOC.* 2010, 132, 15435-15444.
20. G. A. Timco, T. B. Faust, F. Tuna, R. E. P. Winpenny. Linking heterometallic rings for

- quantum information processing and amusement. *Chem. Soc. Rev.*, 2011, 40, 3067-3075.
21. Fernandez, E. Moreno Pineda, J. Fernando-Soria, E. J. L. McInnes, G.A. Timco and R. E. P. Winpenny. A hybrid organic-inorganic molecular daisy chain. *Chem. Commun.* 2015, DOI: 10.1039/c5cc02216a.
 22. C.-F. Lee, D. A. Leigh, R. G. Pritchard, D. Schultz, S. J. Teat, G. A. Timco, R. E. P. Winpenny. Hybrid organic-inorganic rotaxanes and molecular shuttles. *Nature*, 2009, 458, 314 - 318.
 23. J. Fernando-Soria, A. Fernandez, E. M. Pineda, S. A. Varey, R. W. Adams, I. J. Vitorica-Yrezabal, F. Tuna, G. A. Timco, C. A. Muryn, R. E. P. Winpenny. Controlled Synthesis of Nanoscopic Metal Cages. *J. Am. Chem. Soc.* 2015, 137 (24), pp 7644-7647.
 24. G. A. Timco, A. S. Batsanov, F. K. Larsen, C. A. Muryn, J. Overgaard, S. J. Teat, R. E. P. Winpenny. Influencing the nuclearity and constitution of heterometallic rings via templates. *Chem. Commun.*, 2005, 3649-3651.
 25. J. Tasiopoulos, A. Vinslava, W. Wernsdorfer, K. A. Abboud, G. Christou. Giant Single-Molecule Magnets: A {Mn₈} Torus and Its Supramolecular Nanotubes. *Angew. Chem.* 2004, 116, 2169 -2173.
 26. P. Gutlich, H. A. Goodwin. Spin Crossover - An Overall Perspective. *Top. Curr. Chem.* (2004) 233:1-47.
 27. Y.-T. Wang, S.-T. Li, S.-Q. Wu, A.-L. Cui, D.-Z. Shen, H.-Z. Kou. Spin Transitions in Fe(II) Metallogrids Modulated By Substituents, Counteranions, and Solvents. *J. Am. Chem. Soc.* 2013, 135, 5942-5945.

Додаткові ресурси:

Електронні підручники та графічний і звуковий супровід лекцій, що доступні для студентів за ел. адресою:

<https://youtu.be/AT7G35FNROI?si=6lujgAKIxKslwKut>