

Федеральное государственное автономное образовательное  
учреждение высшего образования  
«Московский физико-технический институт  
(государственный университет)»



«УТВЕРЖДАЮ

Проректор по учебной работе  
и экономическому развитию

Д.А. Зубцов

**Рабочая программа дисциплины (модуля)**  
**по дисциплине:** Самосборка и самоорганизация молекул и наноструктур  
**по направлению:** Прикладные математика и физика (бакалавриат)  
**профиль подготовки:** Химическая физика и свойства наноструктур  
Факультет молекулярной и химической физики  
кафедра физики супрамолекулярных систем и нанофотоники  
**курс:** 4  
**квалификация:** бакалавр

Семестры, формы промежуточной аттестации:

7(Осенний) - Дифференцированный зачет

8(Весенний) - Экзамен

Аудиторных часов: 60 всего, в том числе:

лекции: 60 час.

практические и семинарские занятия: 0 час.

лабораторные занятия: 0 час.

Самостоятельная работа: 54 час.

Подготовка к экзамену: 30 час.

Всего часов: 144, всего зач. ед.: 4

**Программу составили:**

Н.А. Лобова, кандидат наук

П.В. Лебедев-Степанов, канд. физ.-мат. наук

**Программа обсуждена на заседании кафедры**

10 июля 2015 г.

СОГЛАСОВАНО:

Заведующий кафедрой

М.В. Алфимов

Начальник учебного управления

И.Р. Гарайшина

Декан факультета

В.М. Некипелов

## 1. Цели и задачи

### Цель дисциплины

Целью курса является изучение основ взаимосвязи химической структуры вещества и его физико-химических свойств для моделирования систем, способных к самосборке и выполнению определенных функций (например, сенсорных).

### Задачи дисциплины

- освоение студентами знаний в области пространственного строения органических соединений, стереохимии;
- приобретение теоретических знаний в области влияния структурных факторов на фотохромизм и люминесценцию соединений;
- изучение терминологии, описывающей взаимоотношения в самоорганизующихся системах;
- приобретение знаний в области движущих сил самосборки и способов управления взаимодействиями.

## 2. Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы

Данная дисциплина относится к вариативной части образовательной программы.

Дисциплина «Самосборка и самоорганизация молекул и наноструктур» базируется на дисциплинах:

Общая и неорганическая химия;  
Органическая химия;  
Введение в математический анализ;  
Дифференциальные уравнения;  
Линейная алгебра.

Дисциплина «Самосборка и самоорганизация молекул и наноструктур» предшествует изучению дисциплин:

Научно-исследовательская работа.

## 3. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы

Освоение дисциплины направлено на формирование следующих общекультурных, общепрофессиональных и профессиональных компетенций:

- способность применять теорию и методы математики для построения качественных и количественных моделей объектов и процессов в естественнонаучной сфере деятельности (ОПК-2);
- способность понимать ключевые аспекты и концепции в области их специализации (ОПК-3);
- способность применять полученные знания для анализа систем, процессов и методов (ОПК-4).

**В результате освоения дисциплины обучающиеся должны**

**знать:**

- место и роль общих вопросов науки в научных исследованиях;
- основы современных представлений в области химии супрамолекулярных систем и нанохимии;
- основы стереохимии, координационной химии;
- принципы построения органических фотохромов и люминофоров;
- постановку проблем физико-химического моделирования;
- о взаимосвязях и фундаментальном единстве естественных наук.

**уметь:**

- пользоваться справочной литературой по химии научного и прикладного характера для быстрого поиска необходимых физико-химических данных и понятий;
- понять, какие свойства нужно придать системе для проявления возможности супрамолекулярной сборки или самоорганизации;
- делать правильные выводы из сопоставления результатов теории и эксперимента;
- оценить соответствие самоорганизованной системы поставленной задаче.

**владеть:**

- химической терминологией и терминологией супрамолекулярной химии;
- методами моделирования процессов самосборки;
- научной картиной мира.

**4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий**

4.1. Разделы дисциплины (модуля) и трудоемкости по видам учебных занятий

№	Тема (раздел) дисциплины	Виды учебных занятий, включая самостоятельную работу				
		Лекции	Практические и семинарские занятия	Лаборат. работы	Задания, курсовые работы	Самост. работа
1	Введение в супрамолекулярную химию	4				6
2	Молекулярное распознавание ионов металлов, анионов и молекул органических соединений	4				6
3	Органические люминофоры	4				5
4	Основные классы фотохромных соединений	4				5
5	Основные понятия и определения самосборки и самоорганизации, теоретические и технологические аспекты	6				10
6	Пространственное строение органических соединений	4				5
7	Пространственное строение соединений азота и координационных соединений	4				5
8	Макроциклы как рецепторные центры молекул и катионов Конформации циклических систем	4				1
9	Моделирование процессов самосборки ансамбля микро- и наночастиц в микрокапле раствора	4				1

10	Образование, структура и спектры «катион-накрытых» комплексов	4				1
11	Поиск оптимальной конформации. Методы оптимизации в ММ	4				1
12	Теория самосборки ансамблей микро- и наночастиц в микрообъеме раствора	6				2
13	Фосфоресценция в трехкомпонентных комплексах	4				1
14	Циклодекстрин как рецепторный центр связывания ароматических молекул	4				5
Итого часов		60				54
Подготовка к экзамену		30 час.				
Общая трудоёмкость		144 час., 4 зач.ед.				

#### 4.2. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам)

Семестр: 7 (Осенний)

##### 1. Введение в супрамолекулярную химию

Концепции, положившие начало супрамолекулярной химии. Основные этапы становления супрамолекулярной химии. Возникновение супрамолекулярной химии как самостоятельной науки. Клатраты и кавитаты. Термины описывающие взаимоотношения между «хозяином» и «гостем». Хелатный и макроциклический эффекты. Природа супрамолекулярных взаимодействий. Основные положения супрамолекулярной химии.

##### 2. Молекулярное распознавание ионов металлов, анионов и молекул органических соединений

Молекулярное распознавание. Распознавание, комплементарность. Виды молекулярного распознавания. Сферическое распознавание. Классы лигандов. Селективность катионного комплексообразования. Тетраэдрическое распознавание. Распознавание ионов аммония и родственных ему субстратов. Линейное распознавание длины молекул при помощи битопных сорцепторов. Хиральное распознавание. Особенности распознавания анионов. Селективность распознавания анионов. Множественное распознавание. Гетеротопные сорцепторы. Молекулы-кавитанды для нейтральных молекул.

##### 3. Органические люминофоры

Особенности строения органических люминофоров. Структурные факторы влияющие на люминесценцию. Основные классы органических люминофоров. Ароматические углеводороды и их замещенные. Соединения с арилэтиленовой группировкой. Соединения с экзоциклической C=N-группой. Пятичленные гетероциклические соединения. Шестичленные гетероциклические соединения. Соединения с карбонильной группой. Применение органических люминофоров.

##### 4. Основные классы фотохромных соединений

Фотохромизм. Реакции фотодиссоциации и фотоперегруппировки. Переходные состояния в согласованных реакциях. Участие гетероатомов в электроциклических реакциях. Фотохромные супрамолекулярные системы. Фотоуправляемые молекулярные машины.

## 5. Основные понятия и определения самосборки и самоорганизации, теоретические и технологические аспекты

История возникновения понятий самосборки и самоорганизации, эволюция понятий, сходство и отличие. Примеры самоорганизации (ячейки Бенара, реакция Белоусова-Жаботинского и др.). Самоорганизация в синергетике. Примеры самосборки ансамблей частиц в растворе (высыхающая капля, пленка раствора). Управляемая самосборка: применение внешних управляющих воздействий.

Общие представления о теоретических методах описания. Роль нелинейности уравнений в синергетике. Роль финитности процесса в случае самосборки, а также наличия локальных и глобальных минимумов свободной энергии системы и диссипативных сил. Аналогия фазового перехода первого рода в атомной физике и переходов тип беспорядок-порядок с упорядочиванием ансамбля наночастиц.

Самосборка в природе (опалы). Самособирающиеся системы в физической химии и нанотехнологиях: примеры, практические приложения, фундаментальное значение.

Технологии самосборки в ЦФ РАН: струйная печать, игла-кольцо, центрифугирование.

Приложения: фотонные кристаллы, элементы хемосенсоров и оптических устройств, барьерные слои и т.д.

## 6. Пространственное строение органических соединений

Стереои́зомерия соединений углерода. Способы пространственного изображения молекул и номенклатура. Хиральность. Симметрия на молекулярном уровне. Энантиомеры и диастереомеры. Конфигурация и конформация. Установление конфигурации. Рацематы. Разнообразие причин хиральности (осевая, планарная и спиральная хиральность). Конформации ациклических систем. Конформации циклических систем.

## 7. Пространственное строение соединений азота и координационных соединений

Стереохимия соединений азота. Разнообразие центров хиральности (соединения фосфора, кремния, серы). Основные понятия координационной химии. Строение комплексов. Дентатность. Хелаты.  $\pi$ -Лиганды. Топичность. Координационное число. Изомерия координационных соединений.

Семестр: 8 (Весенний)

## 8. Макроциклы как рецепторные центры молекул и катионов Конформации циклических систем

Конформации циклических систем (C1-циклогексан), относительные энергии, E, ккал/моль. Конформации циклических систем – 12-краун-4-эфир, 15-краун-5-эфир, 18-краун-6-эфир.

Структуры и энергии образования, ккал/моль, комплексов формилбензокраунэфиров с этиламмонием; комплекса формилбензоаза-15-краун-5-эфира с  $\text{Ca}(\text{ClO}_4)_2$ .

## 9. Моделирование процессов самосборки ансамбля микро- и наночастиц в микрокапле раствора

Назначение компьютерного эксперимента. Результаты реальных экспериментов по самосборке ансамблей наночастиц и теоретической (в т.ч. компьютерной) их интерпретации. Демонстрация видео по испарению капли.

Методы моделирования: континуальный (частицы описываются средней плотностью); полудискретный (частицы описываются явно, растворитель - неявно); дискретный (частицы и растворитель описываются явно: имеет смысл только для наночастиц размером около 1 нм). Замечание о выборе системы единиц. Основные уравнения и методы решения. Аналитические оценки и компьютерный эксперимент. Достижения в компьютерном эксперименте. Основные представления о диссипативной динамике частиц и особенностях ее применения для системы с подвижными внешними границами (уменьшающимся объемом капли или жидкой пленки). Отличие от молекулярной динамики.

Сравнение численного и реального экспериментов.

## 10. Образование, структура и спектры «катион-накрытых» комплексов

Образование, структура и спектры «катион-накрытых» комплексов бензокраун-стириловых красителей, зависимость энергии красителей от расстояния между атомами азота, две наиболее энергетически выгодных структуры.

## 11. Поиск оптимальной конформации. Методы оптимизации в ММ

Поиск оптимальной конформации молекулы и супрамолекулярного комплекса. Методы оптимизации (минимизации) в ММ.

## 12. Теория самосборки ансамблей микро- и наночастиц в микрообъеме раствора

Упорядочение ансамбля частиц в диссипативной открытой системе: физическая сущность явления.

Две основные задачи при описании самосборки в микрокаплях и тонких пленках: 1) Эволюция поверхности капли вследствие испарения жидкости с учетом влияния частиц и связанные с этим поведение контактной линии и гидродинамические потоки. 2) Динамика частиц внутри капли.

Движущие силы самосборки: взаимодействия основных компонентов системы в процессе самосборки. Испарение растворителя. Сольватация наночастиц. Капиллярные взаимодействия между растворителем и частицей, раствором и подложкой.

Способы управления взаимодействиями: изменение внутренних и внешних параметров системы: типов подложек, типов растворителя, типов материала частиц, изменение начальной концентрации, объема капли, температуры и влажности окружающей среды. Критерии учета разных факторов: охлаждения поверхности при испарении, гравитации, потоков Марангони, Рэлея и др.

Растворы наночастиц как объект коллоидной химии. Межчастичные потенциалы в растворе в большом объеме и их особенности в микрокапле. Вандерваальсовы (межмолекулярные) и кулоновские силы. ДЛФО и другие теории.

Кинетика и динамика наночастиц в растворе, роль растворителя, подложки, межфазной границы. Теория Смолуховского и Фукса. Применение ПАВ для стабилизации коллоидных растворов.

## 13. Фосфоресценция в трехкомпонентных комплексах

Флуоресценция эксимеров. Фосфоресценция в трехкомпонентных комплексах. Повышение разрешения спектра фосфоресценции комплекса «нафталин-циклодекстрин - адамантан» при поинжении температуры до 77К. Спектры фосфоресценции при 77К: 1- нафталин-d8 в микрокристаллах ЦД, 2- в гексане, 3 – в диэтиловом эфире и 4 – в трехкомпонентном комплексе нафталин-d8 –ЦД – циклогексан.

#### 14. Циклодекстрин как рецепторный центр связывания ароматических молекул

Строение циклодекстриновых комплексов состава 1:1. Физические характеристики  $\square$ ,  $\square$ ,  $\square$  циклодекстринов. Принципы связывания ароматических молекул.

### 5. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)

Необходимое оборудование для лекций : учебная аудитория, мультимедийное оборудование (проектор, звуковая система).

### 6. Перечень основной и дополнительной литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)

#### Основная литература

1. Илиел Э., Основы стереохимии, М.: Мир, 1971. (Можно любой хороший учебник по органической химии).
2. Скопенко В. В., Цивадзе А. Ю., Савранский Л. И., Гарновский А. Д., Координационная химия, ИКЦ «Академкнига», Москва, 2007, 487 с.
3. Харгиттай И., Харгиттай М. Симметрия глазами химика. – Москва: изд. Мир, 1989.
4. Громов С. П. Фотохромизм молекулярных и супрамолекулярных систем. - М.: МФТИ, 2002.
5. Красовицкий Б. М., Болотин Б. М., Органические люминофоры. - М.: Химия, 1984.
6. Лен Ж.-М., Супрамолекулярная химия. - Новосибирск: Наука, 1998.
7. Стив Дж. В., Этвуд Дж. Л., Супрамолекулярная химия. - т. 1, 2. – Москва: Академкнига, 2007.
8. Николис Г., Пригожин И. Самоорганизация в неравновесных системах. От диссипативных структур к упорядоченности через флуктуации. М.: Мир, 1979.
9. Л.Д. Ландау, Е.М.Лифшиц Теоретическая физика. Т.6 Гидродинамика. М.: Наука. 1986.
10. Л.Д. Ландау, Е.М.Лифшиц Теоретическая физика. Т. 5. Статистическая физика. М.: Наука. 2002.
11. Сивухин Д.В. Общий курс физики. В 5 томах. Том II. Термодинамика и молекулярная физика.
12. Фукс Н.А. Испарение и рост капель в газообразной среде. М. 1958. 93 с.
13. Дерягин Б.В., Чураев Н.В., Муллер В.М. Поверхностные силы. М.: Наука. 1985.
14. Фролов Ю.Г. Курс коллоидной химии. Поверхностные явления и дисперсные системы. М.: Химия. 1989.
15. Каплан И.Г. Введение в теорию межмолекулярных взаимодействий. М.: Наука. 1982.

#### Дополнительная литература

1. Химия комплексов “гость-хозяин”, под ред. Фегтле Ф. и Вебера Э., изд. Мир, М., 1988.
2. Органические фотохромы., под ред. Ельцова А. В.. - Л.: Химия, 1982.
3. J. W. Steed, D. R. Turner, K. J. Wallace, Core concepts in supramolecular chemistry and nanochemistry, Willey, 2007.
4. J. H. Hartley, T. D. James, C. J. Ward, «Synthetic receptors», J. Chem. Soc. Perkin Trans. 1, 2001, 3155-3184.
5. B.V. Derjaguin, L. Landau, Acta Physicochim. U.S.S.R. 14 (1941) 633.
6. E.J.W. Verwey, J.Th. Overbeek, Theory of the Stability of Lyophobic Colloids, Elsevier, Amsterdam, 1948.
7. Ролдугин В.И. Самоорганизация наночастиц на межфазных поверхностях. Успехи химии. 73 (2) 2004, с. 123-156.
8. R. Deegan, Phys. Rev. E, 61, 1 (2000) 475. Deegan, O. Bakajin, T. Dupont, G. Huber, S. Nagel, T. Witten. Phys. Rev. E, 62, 1 (2000) 756.

## **7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)**

1. <http://www.springerlink.com>,
2. <http://www.sensors-research.com>,
3. <http://www.nanojournal.ru>,
4. <http://pubs.acs.org>.

## **8. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины**

Студент, изучающий дисциплину, должен с одной стороны, овладеть общим понятийным аппаратом, а с другой стороны, должен научиться применять теоретические знания на практике.

В результате изучения дисциплины студент должен знать основные определения дисциплины, уметь применять полученные знания для решения различных задач.

Успешное освоение курса требует:

- посещения всех занятий, предусмотренных учебным планом по дисциплине;
- ведения конспекта занятий;
- напряжённой самостоятельной работы студента.

Самостоятельная работа включает в себя:

- чтение рекомендованной литературы;
- проработку учебного материала, подготовку ответов на вопросы, предназначенных для самостоятельного изучения;
- решение задач, предлагаемых студентам на занятиях;
- подготовку к выполнению заданий текущей и промежуточной аттестации.

Показателем владения материалом служит умение без конспекта отвечать на вопросы по темам дисциплины.

Важно добиться понимания изучаемого материала, а не механического его запоминания. При затруднении изучения отдельных тем, вопросов, следует обращаться за консультациями преподавателю.

Возможен промежуточный контроль знаний студентов в виде решения задач в соответствии с тематикой занятий.

## **9. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации по итогам обучения**

Приложение



**ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ  
ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ОБУЧАЮЩИХСЯ  
ПО ДИСЦИПЛИНЕ**

**по направлению:** Прикладные математика и физика (бакалавриат)  
**профиль подготовки:** Химическая физика и свойства наноструктур  
Факультет молекулярной и химической физики  
кафедра физики супрамолекулярных систем и нано  
**курс:** 4  
**квалификация:** бакалавр

Семестры, формы промежуточной аттестации:

7(Осенний) - Дифференцированный зачет

8(Весенний) - Экзамен

**Разработчики:**

Н.А. Лобова, кандидат наук

П.В. Лебедев-Степанов, канд. физ.-мат. наук

## 1. Компетенции, формируемые в процессе изучения дисциплины

Освоение дисциплины направлено на формирование у обучающегося следующих общекультурных (ОК), общепрофессиональных (ОПК) и профессиональных (ПК) компетенций:

способность применять теорию и методы математики для построения качественных и количественных моделей объектов и процессов в естественнонаучной сфере деятельности (ОПК-2);

способность понимать ключевые аспекты и концепции в области их специализации (ОПК-3);

способность применять полученные знания для анализа систем, процессов и методов (ОПК-4).

## 2. Показатели оценивания компетенций

В результате изучения дисциплины «Самосборка и самоорганизация молекул и наноструктур» обучающийся должен:

### знать:

- место и роль общих вопросов науки в научных исследованиях;
- основы современных представлений в области химии супрамолекулярных систем и нанохимии;
- основы стереохимии, координационной химии;
- принципы построения органических фотохромов и люминофоров;
- постановку проблем физико-химического моделирования;
- о взаимосвязях и фундаментальном единстве естественных наук.

### уметь:

- пользоваться справочной литературой по химии научного и прикладного характера для быстрого поиска необходимых физико-химических данных и понятий;
- понять, какие свойства нужно придать системе для проявления возможности супрамолекулярной сборки или самоорганизации;
- делать правильные выводы из сопоставления результатов теории и эксперимента;
- оценить соответствие самоорганизованной системы поставленной задаче.

### владеть:

- химической терминологией и терминологией супрамолекулярной химии;
- методами моделирования процессов самосборки;
- научной картиной мира.

## 3. Перечень типовых контрольных заданий, используемых для оценки знаний, умений, навыков

1. Стереои́зомерия соединений углерода. Способы пространственного изображения молекул и номенклатура.
2. Хиральность. Симметрия на молекулярном уровне. Энантиомеры и диастереомеры.
3. Понятия конфигурации и конформации. Установление конфигурации. Рацемические смеси.
4. Разнообразие причин хиральности (осевая, планарная и спиральная хиральность).
5. Конформации ациклических и циклических систем. Напряженные системы.
6. Стереохимия соединений азота, фосфора, кремния, серы.
7. Основные понятия координационной химии: дентатность, хелаты,  $\sigma$ -лиганды, топичность, координационное число.
8. Изомерия координационных соединений.
9. Явление фотохромизма. Реакции фотохромных систем.
10. Фотохромные супрамолекулярные системы.

11. Особенности строения органических люминофоров. Структурные факторы влияющие на люминесценцию.
12. Основные классы органических люминофоров, их особенности.
13. Концепции, положившие начало супрамолекулярной химии. Термины описывающие взаимоотношения между «хозяином» и «гостем».
14. Клатраты и кавитаты.
15. Хелатный и макроциклический эффекты.
16. Природа и множественность супрамолекулярных взаимодействий.
17. Виды молекулярного распознавания. Комплементарность.
18. Селективность распознавания катионов.
19. Селективность распознавания анионов.
20. Множественное распознавание. Гетеротопные рецепторы.
21. Молекулы-кавитанды для нейтральных молекул.

22. Каков диапазон размеров частиц, по определению относящихся к нанобъектам?

- а) 1-10 нм.
- б) 1-100 нм (правильный ответ)
- в) 1-1000 нм.

23. Каково характерное значение капиллярной постоянной?

- а) 3 мм (правильный ответ)
- б) 3 мкм
- в) 3 нм.

24. Каково изменение энтропии ансамбля наночастиц при самосборке?

- а) растет
- б) убывает (правильный ответ)
- в) не меняется.

25. Между какими частицами действуют силы Ван дер Ваальса?

- а) полярными
- б) неполярными
- в) любого типа (правильный ответ)

26. Как себя ведет коэффициент диффузии коллоидных частиц в растворе в зависимости от температуры?

- а) увеличивается (правильный ответ)
- б) уменьшается
- в) не изменяется.

27. Как изменяется время испарения капель на плоской подложке при уменьшении контактного угла при прочих равных условиях?

- а) не изменяется
- б) увеличивается
- в) уменьшается (правильный ответ)

28. Можно ли увидеть наночастицу в оптический микроскоп?

- а) нет (правильный ответ)
- б) да

29. Как изменяется радиус экранирования заряда коллоидной частицы в растворе при увеличении ионной силы раствора?

- а) увеличивается
- б) не меняется
- в) уменьшается (правильный ответ)

30. Каким процессом обусловлено испарение капли воды в атмосферу при нормальных условиях?

- а) теплопроводностью

б) диффузией (правильный ответ)

в) адсорбцией

31. В чем основное отличие самосборки от самоорганизации?

а) в степени упорядочения

б) нет отличий

в) в финитности процесса самосборки (правильный ответ)

Перечень контрольных вопросов для сдачи экзамена в 8-ом семестре;

1. История возникновения понятий самосборки и самоорганизации, эволюция понятий, сходство и отличие.
2. Самоорганизация в синергетике.
3. Примеры самосборки ансамблей частиц в растворе (высыхающая капля, пленка раствора).
4. Управляемая самосборка: применение внешних управляющих воздействий.
5. Самосборка в природе.
6. «Капельные технологии». Струйная печать, игла-кольцо, центрифугирование. Их специфика.
7. Приложения капельных технологий: фотонные кристаллы, элементы хемосен-соров и оптических устройств, барьерные слои и т.д.
8. Назначение физического моделирования и компьютерного эксперимента в самосборке.
9. Две основные задачи при описании самосборки в микрокаплях и тонких пленках.
10. Движущие силы самосборки: взаимодействия основных компонентов системы в процессе самосборки. Испарение растворителя. Сольватация наночастиц. Капиллярные взаимодействия между растворителем и частицей, раствором и подложкой.
11. Практические способы управления результатом процесса самосборки.
12. Методы моделирования: континуальный; полудискретный; дискретный. Чем регламентируется выбор.
13. Основные представления о диссипативной динамике частиц. Общее и отличия по сравнению с молекулярной динамикой.
14. Автоколебательные процессы в испаряющемся мениске коллоидного раствора.
15. Связывание молекул и катионов макроциклами.
16. Конформации циклических систем: 12(15,18)-краун-4(5,6)эфиры.
17. Структуры и энергии образования комплексов формилбензокраунэфиров с пер-хлоратами щелочноземельных металлов и катионом этиламмония.
18. Энергетически выгодные структуры «катион-накрытых» комплексов бензокраун-стириловых красителей, зависимость энергии комплекса от расстояния между атомами азота.
19. Рецепторные центры связывания ароматических молекул.
20. Физические характеристики  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  циклодекстринов и их комплексы состава 1:1.
21. Флуоресценция эксимеров.
22. Фосфоресценция трехкомпонентных комплексов. Повышение разрешения спектров фосфоресценции.
23. Методы минимизации в молекулярной механике.

#### 4. Критерии оценивания

Оценка отлично 10 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины, проявляющему интерес к данной предметной области, продемонстрировавшему умение уверенно и творчески применять их на практике при решении конкретных задач, свободное и правильное обоснование принятых решений.

Оценка отлично 9 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины и умение уверенно применять их на практике при решении конкретных задач, свободное и правильное обоснование принятых решений.

Оценка отлично 8 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины и умение уверенно применять их на практике при решении конкретных задач, правильное обоснование принятых решений, с некоторыми недочетами.

Оценка хорошо 7 баллов - выставляется студенту, если он твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но недостаточно грамотно обосновывает полученные результаты.

Оценка хорошо 6 баллов - выставляется студенту, если он твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но допускает в ответе или в решении задач некоторые неточности.

Оценка хорошо 5 баллов - выставляется студенту, если он в основном знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но допускает в ответе или в решении задач достаточно большое количество неточностей.

Оценка удовлетворительно 4 бала - выставляется студенту, показавшему фрагментарный, разрозненный характер знаний, недостаточно правильные формулировки базовых понятий, нарушения логической последовательности в изложении программного материала, но при этом он освоил основные разделы учебной программы, необходимые для дальнейшего обучения, и может применять полученные знания по образцу в стандартной ситуации.

Оценка удовлетворительно 3 бала - выставляется студенту, показавшему фрагментарный, разрозненный характер знаний, допускающему ошибки в формулировках базовых понятий, нарушения логической последовательности в изложении программного материала, слабо владеет основными разделами учебной программы, необходимыми для дальнейшего обучения и с трудом применяет полученные знания даже в стандартной ситуации.

Оценка неудовлетворительно 2 бала - выставляется студенту, который не знает большей части основного содержания учебной программы дисциплины, допускает грубые ошибки в формулировках основных принципов и не умеет использовать полученные знания при решении типовых задач.

Оценка неудовлетворительно 1 балл - выставляется студенту, который не знает основного содержания учебной программы дисциплины, допускает грубейшие ошибки в формулировках базовых понятий дисциплины и вообще не имеет навыков решения типовых практических задач.

## **5. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности**

При проведении устного экзамена обучающемуся предоставляется 30 минут на подготовку. Опрос обучающегося по билету на устном экзамене не должен превышать одного астрономического часа.

При проведении устного дифференцированного зачета обучающемуся предоставляется 30 минут на подготовку. Опрос обучающегося по билету на устном дифференцированном зачете не должен превышать одного астрономического часа.