

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

УТВЕРЖДЕНО

**Директор физтех-школы
природоподобных, плазменных и
ядерных технологий им. И.В.**

Курчатова

Т.Е. Григорьев

Рабочая программа дисциплины (модуля)

| | |
|----------------------------|--|
| по дисциплине: | Супрамолекулярная химия |
| по направлению: | Прикладные математика и физика |
| профиль подготовки: | Природоподобные технологии и биомиметический дизайн материалов и систем Физтех-школа природоподобных, плазменных и ядерных технологий им. И.В. Курчатова кафедра нано-, био-, информационных и когнитивных технологий |
| курс: | 1 |
| квалификация: | магистр |

Семестр, формы промежуточной аттестации: 2 (весенний) - Экзамен

Аудиторных часов: 45 всего, в том числе:

лекции: 15 час.

семинары: 30 час.

лабораторные занятия: 0 час.

Самостоятельная работа: 60 час.

Подготовка к экзамену: 30 час.

Всего часов: 135, всего зач. ед.: 3

Программу составил: М.А. Щербина, канд. физ.-мат. наук, доцент

Программа обсуждена на заседании кафедры нано-, био-, информационных и когнитивных технологий
31.03.2025

Аннотация

Целью дисциплины является формирование представлений об основных понятиях супрамолекулярной химии наноразмерных систем, природе супрамолекулярных взаимодействий и молекулярном распознавании как основе образования супрамолекулярных соединений.

1. Цели и задачи

Цель дисциплины

- обучить студентов основным принципам инженерии сложных супрамолекулярных структур, как соединений включения, так и частично упорядоченных самоорганизующихся мезоморфных систем, а также сформировать у учащихся целостное понимание мультидисциплинарного характера супрамолекулярной химии, включающей в себя органическую, неорганическую, координационную, коллоидную химию, физику конденсированного состояния, энзимологию, вирусологию и другие разделы современной фундаментальной науки.

Задачи дисциплины

- формирование общих представлений о мезоморфных системах (трехмерные мицеллярные и биконтинуальные мезофазы, пластические кристаллы, ротационно-кристаллическая мезофазы, кондис-кристаллы, жидкокристаллические мезофазы нематического, смектического, холестерического типа);
- определение взаимосвязи между химической структурой и геометрией молекул с одной стороны, и строением супрамолекулярных агрегатов и фазовым поведением системы – с другой;
- приобретение учащимися специальных знаний об основных методах характеристики мезоморфных систем (дифракционные, оптические и теплофизические методы исследования);
- обучение студентов базовым приемам синтеза соединений включения;
- определение взаимосвязи между химической структурой макроциклических соединений и их селективностью по отношению к тем или иным экзорепцепторам (анионы, катионы, нейтральные молекулы, биологически активные компоненты);
- приобретение учащимися представлений об основных областях применения супрамолекулярных систем и мезоморфных состояний.

2. Перечень формируемых компетенций

Освоение дисциплины направлено на формирование следующих компетенций:

| Код и наименование компетенции | Индикаторы достижения компетенции |
|---|--|
| УК-2 Способен управлять проектом на всех этапах его реализации | УК-2.1 Формулирует в рамках обозначенной проблемы, цель, задачи, актуальность, значимость (научную, практическую, методическую и иную в зависимости от типа проекта), ожидаемые результаты и возможные сферы их применения |
| | УК-2.2 Способен прогнозировать результат деятельности и планировать последовательность шагов для достижения данного результата. Формирует план-график реализации проекта в целом и план контроля его выполнения |
| | УК-2.3 Способен организовать и координировать работу участников проекта, обеспечивать работу команды необходимыми ресурсами |
| | УК-2.4 Представляет публично результаты проекта (или отдельных его этапов) в форме отчетов, статей, выступлений на научно-практических конференциях, семинарах и т.п. |
| ПК-3 Способен профессионально работать с исследовательским и испытательным оборудованием (приборами и установками, специализированными пакетами прикладных программ) в избранной предметной области | ПК-3.1 Понимает принципы работы используемого оборудования (специализированных пакетов прикладных программ) |
| | ПК-3.2 Способен проводить эксперимент (моделирование) с использованием исследовательского оборудования (пакетов прикладных программ) |

3. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю)

В результате освоения дисциплины обучающиеся должны

знать:

- предмет и объекты супрамолекулярной химии, современные концепции супрамолекулярной химии;
- процессы молекулярного распознавания, адаптации и преобразования;
- физико-химические основы гомогенного и гетерогенного зародышеобразования;
- структурные особенности основных классов частично-упорядоченных мезофаз (пластические кристаллы, двумерные колончатые, ротационно-кристаллическая фаза, жидкокристаллические нематическая, смектическая, холестерическая мезофазы);
- основы физической неорганической и коллоидной химии, основы общей и органической химии;
- структуру, номенклатуру и физико-химические свойства простейших органических и неорганических соединений: кислот и оснований Льюиса, солей, щелочей; полимеров и сополимеров, дендримеров;
- структуру, номенклатуру и физико-химические свойства комплексных соединений, в том числе построенных по принципу гость-хозяин: сферандов, гемисферандов, криптанов, геликатов, катенанов, ротаксанов;
- структуру, номенклатуру и физико-химические свойства основных классов макроциклических молекул, в том числе, краун-эфиров, циклодекстринов, каликсаренов, фталоцианинов и др.;
- принципы их моделирования, конструирования, создания и изменения структуры различными физико-химическими методами;
- технику безопасности работы в химической лаборатории.

уметь:

- использовать физические законы для выполнения качественных и количественных оценок измеряемых физических величин;
- пользоваться подходами и методами теории конденсированного состояния вещества;
- устанавливать связь между структурой соединений и их физическими и химическими свойствами.

владеть:

- методами анализа и моделирования физических процессов в системах, в том числе и наноразмерных;
- навыками планирования и ведения самостоятельной работы в научной библиотеке, лаборатории и интернете.
- методиками разработки, моделирования, синтеза, анализа и исследования основных классов супрамолекулярных систем.

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 | Трудоемкость по видам учебных занятий, включая самостоятельную работу, час. | | | |
|---|--|---|----------|-----------------|----------------|
| | | Лекции | Семинары | Лаборат. работы | Самост. работа |
| 1 | Биохимические аспекты супрамолекулярной самоорганизации. Применения самоорганизации. | 1 | 4 | | 4 |
| 2 | Введение и мотивация курса. | 1 | 2 | | 4 |
| 3 | Коллоидная химия супрамолекулярных частиц. | 1 | 4 | | 3 |

| | | | | | |
|-----------------------|--|---------------------|----|--|----|
| 4 | Координационная химия супрамолекулярных агрегатов. | 1 | 4 | | 4 |
| 5 | Кристаллохимия объектов супрамолекулярной химии. Рентгеноструктурный анализ. | 3 | 4 | | 4 |
| 6 | Общая и неорганическая химия применительно к объектам супрамолекулярной химии. | 2 | 2 | | 13 |
| 7 | Супрамолекулярная химия полимеров. | 2 | 2 | | 4 |
| 8 | Физическая химия супрамолекулярных ансамблей. | 2 | 4 | | 4 |
| 9 | Химия органических супрамолекулярных соединений. | 2 | 4 | | 20 |
| Итого часов | | 15 | 30 | | 60 |
| Подготовка к экзамену | | 30 час. | | | |
| Общая трудоёмкость | | 135 час., 3 зач.ед. | | | |

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

Семестр: 2 (Весенний)

1. Биохимические аспекты супрамолекулярной самоорганизации. Применения самоорганизации.

Химия и биохимия макроциклических лигандов. Структура липидов. Липидные слои и липидные мембраны. Липосомы. Трёхмерные структуры. Полиэлектролиты.

Применения самоорганизации.

Самоорганизующиеся слои для электроники и оптоэлектроники. Молекулярные проводящие ионные каналы. Ион-селективные мембраны. Паттернирование для микроконтактной печати. Фотонные кристаллы. Нанопористые материалы. Системы точечной доставки лекарств.

2. Введение и мотивация курса.

Супрамолекулярная химия, как часть научного знания и самостоятельная наука. Работы Ч. Педерсена, Д. Крама, Ж.-М. Лена. Типы составных единиц супрамолекулярных агрегатов. Факторы, влияющие на форму супрамолекулярных агрегатов. Соединения включения и их классификация: кавитанды, клатранды. Молекулярное распознавание. Комплементарность.

3. Коллоидная химия супрамолекулярных частиц.

Основы коллоидной химии. Уравнение Гиббса. Критическая концентрация мицеллообразования. Взаимодействия между амфифильными молекулами и гидрофобный эффект. Влияние растворителя на структуру супрамолекулярных агрегатов. Самоорганизация дифильных молекул на границе раздела фаз жидкость-воздух (ленгмюровский монослой). Формирование и исследование двумерных плёнок дифильных веществ на границе раздела фаз жидкость-воздух в режиме сжатия-растяжения: измерение поверхностного давления и поверхностного потенциала. Визуализация морфологии плёнок непосредственно на поверхности воды при помощи брестерского микроскопа. Метод Ленгмюра-Блоджетт: одно- и многостадийный перенос моно- или полислоевой плёнки, сформированной на поверхности жидкости, на твёрдую подложку.

4. Координационная химия супрамолекулярных агрегатов.

Комплексообразование, координационные соединения. Лиганды. Координационная теория Вернера. Бинарные смеси – сплавы металлов, полимерные пленки. Постулаты Эрлиха и Фишера. Классификация комплексных соединений: аквакомплексы, анионгалогенаты, катионгалогены, π -комплексы, металлоцены, хелаты.

5. Кристаллохимия объектов супрамолекулярной химии. Рентгеноструктурный анализ.

Упорядоченное состояние. Теория кристаллического поля. Координационное число. Координационный полиэдр. Координационная сфера. Мезоморфное состояние вещества: жидкие кристаллы, пластические кристаллы. Жидкие кристаллы: классификация (нематики, смектики, холестерики), характерные текстуры, Термотропные и лиотропные структуры. Глобулярные кристаллы. Плотнейшие упаковки и кладки. Аперiodические кристаллы. Характерные виды текстур жидких кристаллов. Теория супрамолекулярных жидких кристаллов. Влияние внешних условий на фазовое поведение.

Рентгеноструктурный анализ.

Основы принципы дифракции рентгеновских лучей и нейтронов. Рассеяние объектами с различной упорядоченностью – монокристаллы, одномерно-периодические системы, цилиндрически-симметричные объекты, изотропные системы. Интенсивность как функция Фурье электронной плотности. Асимптотики Гинье и Порода. Функция парных корреляций. Малоугловое рассеяние дисперсными системами – растворы частиц, понятие контраста, монодисперсные и полидисперсные растворы. Восстановление распределения электронной плотности из относительной интенсивности малоугловых рентгеновских рефлексов.

6. Общая и неорганическая химия применительно к объектам супрамолекулярной химии.

Электронное строение атома. Электронные конфигурации, уравнение Шредингера. Квантовые числа: главное, магнитное, спиновое, орбитальное. Электроотрицательность, сродство к электрону. Метод молекулярных орбиталей. Метод валентных связей. Определение химической связи. Понятие валентности и координационного числа. Длина связи, валентный угол, полярность, энергия связи. Гибридизация и определение формы многоатомных частиц. Типы связей, химические и физические связи. Химические двухэлектронные связи: ковалентные (полярная, не полярная донорно-акцепторная), ионная. Химические соединения с дефицитными структурами (ароматические структуры, бороводороды). Металлическая связь. Межмолекулярные взаимодействия: электростатическое (ориентационное, индукционное, дисперсионное); донорно-акцепторное взаимодействие. Водородная связь. Типы химической связи в кристаллах: ионные, атомные (ковалентная, металлическая) и молекулярные. Движущие силы самоорганизации. Водородные связи. Ион-дипольные, диполь-дипольные, π - π взаимодействия. Ван-дер-Ваальсовы силы.

7. Супрамолекулярная химия полимеров.

Полимеры. Определение, жесткоцепные и гибкоцепные. Статистическая термодинамика смесей и сплавов полимеров. Смеси кристаллических полимеров, их структура. Смеси из жесткоцепных полимеров. Решеточная модель Флори для термотропных и лиотропных смесей. Фазовая стабильность. Ротационно-кристаллическая фаза в полимерах. Гибкие линейные макромолекулы. Гибкоцепные полимеры с длинными боковыми заместителями. Жесткие макромолекулы с гибкими боковыми заместителями. Дискотики. Секторо- и конусообразные дендроны. Дендримеры – частицы-молекулы. Растворимость и совместимость полимеров. Термодинамические критерии взаиморастворимости. Системы с водородной связью. Блок-сополимеры. Теория фазовых переходов в блок-сополимерах. Термодинамический подход Израйлашвили. Обзор моделей SAFT, PRISM, LCT. Случаи сильной и слабой сегрегации. Общая теория Матсена-Бэйтса. Влияние внешних геометрических ограничений на фазовые превращения в блок-сополимерах.

8. Физическая химия супрамолекулярных ансамблей.

Фазовые переходы первого и второго рода. Термостимулированное разделение фаз и фазовая стабильность. Химический потенциал. Энтропия конфигурационная и конформационная. Модель Флори-Хаггинса. Определение температуры стеклования методами дифференциального термического анализа и дифференциальной сканирующей калориметрии. Время релаксации, релаксационные переходы.

9. Химия органических супрамолекулярных соединений.

Взаимодействия типа ключ-замок. Селективность. Краун-эфиры и хиральная селективность. Макроциклические полиамины. Циклодекстрины. Каликсарены – соединения с регулируемой селективностью. Дизайн точек молекулярного распознавания. Лестничные структуры, сетки, решетки. Линейные компоненты супрамолекулярных сеток: гибкие компоненты, жесткие компоненты – основания Шиффа, гибкие триподы. Циклические синтоны, плоские макроциклы – фталоцианины. Динамеры. Ротаксаны. Катенаны и молекулярные капсулы. Дендримеры – частицы-молекулы.

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

учебная аудитория, оснащенная компьютером и мультимедийным оборудованием (проектор, звуковая система).

6. Перечень рекомендуемой литературы

Основная литература

Фонд литературы кафедры

1. Сид Дж.В., Этвуд Дж.Л. Супрамолекулярная химия. Пер. с англ.: в 2 т. – М.: Академкнига, 2007.
2. Cragg P.J. A Practical Guide to Supramolecular Chemistry. – New York: John Wiley & Sons Ltd., 2005.
3. Израелашвили Дж. Межмолекулярные и поверхностные силы. Пер. с англ. – М.: Научный мир, 2011.
4. Davis F., Higson S. Macrocycles: Construction. Chemistry and Nanotechnology Applications. – New York: John Wiley & Sons Ltd., 2011.
5. Волынский А.Л., Бакеев Н.Ф. Структурная самоорганизация аморфных полимеров. – М.: Физматлит, 2005.

Дополнительная литература

1. Общая и неорганическая химия [Текст] : учебник для вузов : рек.М-вом обр.РФ / Н. С. Ахметов . — 4-е изд., исправл. — М. : Высшая шк., 2001 . — 743 с.
2. Фигуровский Н.А. История химии: Учебное пособие. — М.: Просвещение, 1979.
3. Физер Л., Физер М. Органическая химия. Углубленный курс. Том 1 и 2. – М.: Химия, 1966.
4. Jeffrey G.A. An introduction to hydrogen bonding. – Oxford: Oxford University press, 1997.
5. Урусов В.С. Теоретическая кристаллохимия. — М.: МГУ, 1987. .
6. Най Дж. Физические свойства кристаллов. —М.: Иностранная литература, 1970.
7. Вайнштейн Б.К. Дифракция рентгеновских лучей на цепных молекулах. – М.: Издательство Академии наук СССР, 1963.
8. Воюцкий С.С. Курс коллоидной химии. – М.: Химия, 1975.
9. Beer P.D., Gale P.A., Smith D.K. Supramolecular Chemistry. – Oxford: Oxford University press, 1997.
10. Хираока М. Краун-соединения. Свойства и применения. – М.: Мир, 1986.
11. Платэ Н.А., Васильев А.Е. Физиологически активные полимеры. — М.: Химия, 1986.
12. Ван Кревелен Д. В. Свойства и химическое строение полимеров. – М.: Химия, 1976.
13. Годовский Ю.К. Теплофизика полимеров. — М.: Химия, 1982.

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

1. <http://lib.mipt.ru> – электронная библиотека Физтех.
2. <http://www.Sci-lib.com> – Большая научная библиотека.
3. <http://www.ch.kcl.ac.uk/supramol/textbook.html> - ссылки на тематические статьи и информацию.
4. <http://www.mdli.com/chemscape/chime> - программное обеспечение Chemscape Chime Software для интерактивного 3D-просмотра молекулярных структур.

8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень необходимого программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)

Microsoft Office PowerPoint, HyperChem, Cambridge Soft Chem Office.

9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)

Для успешного освоения курса, помимо посещения лекций и семинаров, от студентов требуется самостоятельная работа в объеме не меньшем, чем часы, указанные для каждого раздела программы (всего не менее 27 часов в семестр). В основном, это время отводится на самостоятельное чтение литературы по пройденным и смежным темам. Самостоятельные занятия включают в себя также повторение материала лекций. В качестве промежуточного контроля будет проведено 2 коллоквиума по пройденным темам. Студенты, успешно прошедшие все формы промежуточного контроля, допускаются к сдаче экзамена по дисциплине.

ПРИЛОЖЕНИЕ

ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ПО ДИСЦИПЛИНЕ (МОДУЛЮ)

| | |
|---|---|
| по направлению: | Прикладные математика и физика |
| профиль подготовки: | Природоподобные технологии и биомиметический дизайн материалов и систем Физтех-школа природоподобных, плазменных и ядерных технологий им. И.В. Курчатова кафедра нано, био, информационных и когнитивных технологий |
| курс: | <u>1</u> |
| квалификация: | магистр |
| Семестр, формы промежуточной аттестации: 2 (весенний) - Экзамен | |
| Разработчик: | М.А. Щербина, канд. физ.-мат. наук, доцент |

1. Компетенции, формируемые в процессе изучения дисциплины

| Код и наименование компетенции | Индикаторы достижения компетенции |
|---|--|
| УК-2 Способен управлять проектом на всех этапах его реализации | УК-2.1 Формулирует в рамках обозначенной проблемы, цель, задачи, актуальность, значимость (научную, практическую, методическую и иную в зависимости от типа проекта), ожидаемые результаты и возможные сферы их применения |
| | УК-2.2 Способен прогнозировать результат деятельности и планировать последовательность шагов для достижения данного результата. Формирует план-график реализации проекта в целом и план контроля его выполнения |
| | УК-2.3 Способен организовать и координировать работу участников проекта, обеспечивать работу команды необходимыми ресурсами |
| | УК-2.4 Представляет публично результаты проекта (или отдельных его этапов) в форме отчетов, статей, выступлений на научно-практических конференциях, семинарах и т.п. |
| ПК-3 Способен профессионально работать с исследовательским и испытательным оборудованием (приборами и установками, специализированными пакетами прикладных программ) в избранной предметной области | ПК-3.1 Понимает принципы работы используемого оборудования (специализированных пакетов прикладных программ) |
| | ПК-3.2 Способен проводить эксперимент (моделирование) с использованием исследовательского оборудования (пакетов прикладных программ) |
| | ПК-3.3 Способен оценивать точность полученных экспериментальных (численных) результатов |

2. Показатели оценивания компетенций

В результате изучения дисциплины «Супрамолекулярная химия» обучающийся должен:

знать:

- предмет и объекты супрамолекулярной химии, современные концепции супрамолекулярной химии;
- процессы молекулярного распознавания, адаптации и преобразования;
- физико-химические основы гомогенного и гетерогенного зародышеобразования;
- структурные особенности основных классов частично-упорядоченных мезофаз (пластические кристаллы, двумерные колончатые, ротационно-кристаллическая фаза, жидкокристаллические нематическая, смектическая, холестерическая мезофазы);
- основы физической неорганической и коллоидной химии, основы общей и органической химии;
- структуру, номенклатуру и физико-химические свойства простейших органических и неорганических соединений: кислот и оснований Льюиса, солей, щелочей; полимеров и сополимеров, дендримеров;
- структуру, номенклатуру и физико-химические свойства комплексных соединений, в том числе построенных по принципу гость-хозяин: сферандов, гемисферандов, криптанов, геликатов, катенанов, ротаксанов;
- структуру, номенклатуру и физико-химические свойства основных классов макроциклических молекул, в том числе, краун-эфиров, циклодекстринов, каликсаренов, фталоцианинов и др.;
- принципы их моделирования, конструирования, создания и изменения структуры различными физико-химическими методами;
- технику безопасности работы в химической лаборатории.

уметь:

- использовать физические законы для выполнения качественных и количественных оценок измеряемых физических величин;
- пользоваться подходами и методами теории конденсированного состояния вещества;
- устанавливать связь между структурой соединений и их физическими и химическими свойствами.

владеть:

- методами анализа и моделирования физических процессов в системах, в том числе и наноразмерных;
- навыками планирования и ведения самостоятельной работы в научной библиотеке, лаборатории и интернете.
- методиками разработки, моделирования, синтеза, анализа и исследования основных классов супрамолекулярных систем.

3. Перечень типовых (примерных) вопросов, заданий, тем для подготовки к текущему контролю

В целях текущего контроля успеваемости предусмотрен краткий опрос по темам предыдущих занятий по теме прошлой лекции или в конце занятия по пройденной теме.

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

Промежуточная аттестация по дисциплине «Супрамолекулярная химия» осуществляется в форме экзамена. Экзамен проводится в устной форме.

Примеры экзаменационных билетов

Билет 1.

1. Теория среднего поля. Бинарные смеси – сплавы металлов, полимерные пленки. Параметр порядка и его пространственные корреляции.
2. Термотропные системы и фазовые переходы. Блок-сополимеры. Случаи сильной и слабой сегрегации. Общая теория Матсена-Бэйтса. Влияние внешних геометрических ограничений на фазовые превращения в блок-сополимерах.
3. Зондовая микроскопия. Контактный, полуконтактный и бесконтактный режимы сканирования. Модели взаимодействия зонда и поверхности. Измерение локальных механических свойств поверхности.

Билет 2.

1. Основы коллоидной химии. Критическая концентрация мицеллообразования.
2. Термотропные системы. Фазовые переходы в соединениях на основе галловой кислоты. Фазовые переходы на основе бензолсульфоновой кислоты. Колончатые структуры, сформированные бола-амфифильными молекулами.
3. Электростатическая силовая микроскопия, Кельвин-зондовая силовая микроскопия, магнитно-силовая спектроскопия.

Билет 3.

1. Движущие силы самоорганизации. Водородные связи. Ион-дипольные, диполь-дипольные, катионные, анионные взаимодействия. Ван-дер-Ваальсовы силы и принцип плотнейшей упаковки. Взаимодействия между амфифильными молекулами и гидрофобный эффект. Влияние растворителя на структуру супрамолекулярных агрегатов.
2. Лиотропные системы. Структура липидов. Липидные слои и липидные мембраны. Липосомы. Трехмерные структуры.
3. Скейлинговые подходы описания морфологии поверхности. Параметризация случайно-шероховатых поверхностей. Самоаффинные поверхности. Определение скейлинговых коэффициентов.

Билет 4.

1. Взаимодействия типа ключ-замок. Селективность. Краун-эфиры и хиральная селективность. Макроциклические полиамины.
2. Пластические кристаллы. Дендримеры – частицы-молекулы. Ротационно-кристаллическая фаза в полимерах. Гибкие линейные макромолекулы. Гибкоцепные полимеры с длинными боковыми заместителями. Жесткие макромолекулы с гибкими боковыми заместителями.
3. Фазовые переходы первого и второго рода в полимерах. Определение температуры стеклования методами дифференциального термического анализа и дифференциальной сканирующей калориметрии. Время релаксации, релаксационные переходы. Термогравиметрический анализ.

Билет 5.

1. Линейные компоненты супрамолекулярных сеток: гибкие компоненты, жесткие компоненты – основания Шиффа, гибкие триподы. Циклические синтоны, плоские макроциклы – фталоцианины. Динамеры.
2. Жидкие кристаллы. Нематики. Смектики. Классификация смектиков. Холестерики. Характерные виды текстур жидких кристаллов.
3. Основы принципы дифракции рентгеновских лучей и нейтронов. Рассеяние объектами с различной упорядоченностью – монокристаллы, одномерно-периодические системы, цилиндрически-симметричные объекты, изотропные системы.

Билет 6.

1. Ротаксаны. Классификация. Синтез.
2. Самоорганизация дифильных молекул на границе раздела фаз жидкость-воздух в Ленгмюровский монослой. Формирование и исследование двумерных пленок дифильных веществ на границе раздела фаз жидкость-воздух в режиме сжатие-растяжение: измерение поверхностного давления и поверхностного потенциала.
3. Самоорганизующиеся слои для электроники и оптоэлектроники.

Билет 7.

1. Катенаны. Классификация. Синтез.
2. Визуализация морфологии пленок непосредственно на поверхности воды при помощи Брюстеровского микроскопа. Метод Ленгмюра-Блоджетт: одно- и многостадийный перенос моно- или полислоевой пленки, сформированной на поверхности жидкости, на твердую подложку.
3. Ион-селективные мембраны. Фотонные кристаллы.

Билет 8.

1. Циклодекстрины. Каликсарены – соединения с регулируемой селективностью.
2. Паттернирование для микроконтактной печати. Фотонные кристаллы. Нанопористые материалы.
3. Восстановление распределения электронной плотности из относительной интенсивности малоугловых рентгеновских рефлексов.

Билет 9.

1. Электронное строение атома. Квантовые числа: главное, магнитное, спиновое, орбитальное. Электронные конфигурации.
2. Упорядоченное состояние. Координационное число. Координационный полиэдр. Координационная сфера.
3. Инфракрасное излучение и колебания молекул. Гармонические и ангармонические колебания. Колебания многоатомных молекул. Характеристичные колебательные частоты органических соединений. Интерпретация инфракрасных спектров.

Билет 10.

1. Фазовые переходы первого и второго рода. Термостимулированное разделение фаз и фазовая стабильность. Химический потенциал. Энтропия конфигурационная и конформационная. Модель Флори-Хаггинса.

2. Мезоморфное состояние вещества: жидкие кристаллы, пластические кристаллы. Классификация ЖК, нематики, смектики, холестерики. Глобулярные кристаллы.
3. Предел разрешения светового и электронного микроскопов. Формирование изображения в световом и электронном микроскопе. Поглощение света. Уравнение Бугера - Ламберта - Бера.

Билет 11.

1. Краун-эфиры и хиральная селективность.
2. Плотнейшие упаковки и кладки. Термотропные и лиотропные структуры.
3. Уравнение Шредингера. Восстановление распределения электронной плотности из относительной интенсивности малоугловых рентгеновских рефлексов.

Билет 12.

1. Гибкоцепные полимеры с длинными боковыми заместителями. Жесткие макромолекулы с гибкими боковыми заместителями.
2. Движущие силы самоорганизации.
3. Основы принципы дифракции рентгеновских лучей и нейтронов. Рассеяние объектами с различной упорядоченностью

Билет 13.

1. Дискотики. Секторо- и конусообразные дендроны.
2. Химическая связь. Понятие валентности и координационного числа. Длина связи, валентный угол, полярность, энергия связи. Гибридизация. Типы связей.
3. Методы молекулярной механики. Моделирование сложных полимерных систем. Анализ молекулярной структуры в численных экспериментах. Неравновесная молекулярная динамика.

Билет 14.

1. Структура липидов. Липидные слои и липидные мембраны. Липосомы. Трехмерные структуры.
2. Влияние внешних геометрических ограничений на фазовые превращения в блок-сополимерах.
3. Строение адсорбционных пленок на жидкой поверхности. Пленки, перенесенные на твердую подложку с поверхности воздух – вода / пленки Ленгмюра-Блоджетт.

Билет 15.

1. Комплексообразование, координационные соединения. Классификация комплексных соединений.
2. Решеточная модель Флори для термотропных и лиотропных смесей. Фазовая стабильность.
3. Атомная силовая микроскопия. Зондовая микроскопия. Контактный, полуконтактный и бесконтактный режимы сканирования. Модели взаимодействия зонда и поверхности.

4. Критерии оценивания

| Оценка | Баллы | Критерии |
|---------|-------|---|
| отлично | 10 | 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. |
| | 9 | 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. |
| | 8 | 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. |
| хорошо | 7 | 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. |
| | 6 | 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. |
| | 5 | 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. |

| | | |
|---------------------|---|--|
| удовлетворительно | 4 | 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. |
| | 3 | 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. |
| неудовлетворительно | 2 | 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. |
| | 1 | 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 экзамена обучающемуся предоставляется не менее 60 минут на подготовку. Опрос по билету и ответы на дополнительные вопросы не должен превышать двух астрономических часов. По завершении отведенного на опрос времени, экзаменатор должен выставить обучающемуся оценку в соответствии с вышеприведенными критериями. Во время проведения экзамена обучающиеся могут пользоваться программой дисциплины, а также справочной литературой, вычислительной техникой.