

**ГОУ ВПО «ДОНЕЦКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

**Химический факультет**  
**Кафедра физической химии**

**УТВЕРЖДАЮ:**  
проректор по научно-методической  
и учебной работе

*Е.И. Скафа*  
«*22*» *августа* 2020 г.



**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ**  
**«Супрамолекулярная химия»**

Направление подготовки:	04.03.01 Химия
Профиль подготовки:	—
Образовательная программа:	бакалавриат
Квалификация:	академический бакалавр
Форма обучения:	<u>очная</u> , очно-заочная, заочная

Донецк 2020



УТВЕРЖДАЮ:

Декан химического факультета

А.В. Белый

« 16 » апреля 2020 г.

Программа учебной дисциплины «Супрамолекулярная химия» составлена на основании Государственного образовательного стандарта высшего профессионального образования (ГОС ВПО) Донецкой Народной Республики (ДНР) по направлению подготовки 04.03.01 Химия, утвержденного приказом Министерства образования и науки ДНР № 454 от «20» апреля 2016 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 04.03.01 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

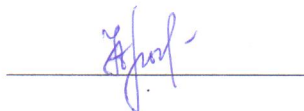


В.М. Михальчук

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

Учебная дисциплина «Супрамолекулярная химия» относится к вариативной части профессионального блока дисциплин (ПБ.ВС.6) подготовки студентов ОУ Бакалавр по направлению подготовки 04.03.01 Химия. Дисциплина реализуется на химическом факультете ДонНУ кафедрой физической химии. Основывается на базе дисциплин: «Неорганическая химия», «Органическая химия», «Физическая химия», «Квантовая химия», «Информатика». Является основой для выполнения дипломной работы бакалавра.

## 2. СТРУКТУРА ДИСЦИПЛИНЫ

<i>Характеристика учебной дисциплины</i>		
Специальность	04.03.01 Химия	
Специализация		
Образовательная программа	Бакалавриат	
Квалификация	Академический бакалавр	
Количество содержательных модулей	1	
Дисциплина базовой / вариативной части образовательной программы	Вариативная часть профессионального блока	
Формы контроля (МК, экзамен, зачет)	МК, зачет	
Показатели	очная форма обучения	заочная форма обучения
Количество зачетных единиц (кредитов)	2.5	
Год подготовки	4	
Семестр	7	
Количество часов	90	
- лекционных	18	
- практических, семинарских	-	
- лабораторных	18	
- самостоятельной работы	54	
в т.ч. индивидуальное задание	-	
Недельное количество часов,	5	
в т.ч. аудиторных	2	

## 3. ОПИСАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

### Цели:

- *педагогическая* – формирование у студентов панорамы знаний о атомно-молекулярной архитектуре и электронной структуре химических соединений на молекулярном и супрамолекулярном уровнях;
- *дидактическая* – усвоение знаний, предусмотренных программой, благодаря целенаправленному сотрудничеству преподавателя и студента;
- *методическая* – выделить главное звено в каждой теме, что будет способствовать формированию основных понятий по курсу, формированию знаний в результате активизации познавательной деятельности студентов, применение различных методов активного обучения.

### Задачи:

- 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 ГОС ВПО ДНР по направлению подготовки 04.03.01 Химия и основной образовательной программы высшего профессионального образования направления подготовки 04.03.01 Химия:

**а) общекультурных (ОК):**

- способностью использовать основы философских знаний для формирования мировоззренческой позиции (ОК-1);
- способностью к самоорганизации и самообразованию (ОК-7).

**б) общепрофессиональных (ОПК):**

- способностью использовать полученные знания теоретических основ фундаментальных разделов химии при решении профессиональных задач (ОПК-1);
- владением навыками проведения химического эксперимента, основными синтетическими и аналитическими методами получения и исследования химических веществ и реакций (ОПК-2);
- способностью использовать основные законы естественнонаучных дисциплин в профессиональной деятельности (ОПК-3);
- знанием норм техники безопасности и умением реализовать их в лабораторных и технологических условиях (ОПК-6).

**в) профессиональных (ПК):**

**научно-исследовательская деятельность**

- способностью выполнять стандартные операции по предлагаемым методикам (ПК-1);
- владением базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований (ПК-2);
- владением системой фундаментальных химических понятий (ПК-3);
- способностью применять основные естественнонаучные законы и закономерности развития химической науки при анализе полученных результатов (ПК-4);
- способностью получать и обрабатывать результаты научных экспериментов с помощью современных компьютерных технологии (ПК-5);
- владением навыками представления полученных результатов в виде кратких отчетов и презентаций (ПК-6);
- владением методами безопасного обращения с химическими материалами с учетом их физических и химических свойств (ПК-7).

**производственно-технологическая деятельность**

- способностью использовать основные закономерности химической науки и фундаментальные химические понятия при решении конкретных производственных задач (ПК-8).

**организационно-управленческая деятельность:**

способностью принимать решения в стандартных ситуациях, брать на себя ответственность за результат выполнения заданий (ПК-12).

**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

Порядковый номер и наименование темы	Краткое содержание темы
<b>Содержательный модуль 1</b>	
<b>Тема 1.</b> 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, сферандов и подандов в реакциях образования супрамолекулярных соединений.
<b>Тема 2.</b> Молекулярное распознавание	Молекулярное распознавание реагентов в супрамолекулярных реакциях. Выбор реагентов химической

реактантов в реакциях образования супрамолекулярных соединений.	реакции. Молекулярная информация реактантов. Кинетически стабильные супрамолекулярные комплексы. Кинетическая лабильность супрамолекулярных комплексов. Термодинамическая стабильность супрамолекулярных комплексов. Молекулярный докинг реактантов на уровне их взаимодействий. Хелатный эффект в процессе молекулярного распознавания реактантов. Макроциклический эффект в процессе молекулярного распознавания реактантов. Темплатный эффект. Кинетический темплатный эффект. Термодинамический темплатный эффект.
<p><i>Тема 3.</i></p> <p>Комплементарность молекулярной информации реактантов на уровне их взаимодействия.</p>	<p>Комплементарность зарядовой молекулярной информации реактантов на уровне их взаимодействия. Кинетически инертные супрамолекулярные комплексы. Комплементарность орбитальной молекулярной информации реактантов на уровне их взаимодействия. Комплементарность стереохимической молекулярной информации реактантов на уровне их взаимодействия. Принцип двойной комплементарности молекулярной информации реактантов на уровне их взаимодействия. Динамическая комплементарность молекулярной информации реактантов 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>
<p><i>Тема 4.</i></p> <p>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><i>Тема 5.</i></p> <p>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</p>

	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.
<b>Тема 6.</b> Супрамолекулярный катализ.	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.
<b>Тема 7.</b> Актуальные направления супрамолекулярной химии.	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.

### Тематический план

Содержательный модуль 1						
Названия содержательных модулей и тем	Количество часов					
	Очная форма обучения					
	в т.ч.					
	всего	лекции	практические	лабораторные	самостоятельная работа	индивидуальная работа
<b>Тема 1.</b> Супрамолекулярная химия: возникновение, развитие, перспективы.	12	2		2	8	
<b>Тема 2.</b> Молекулярное распознавание реагентов в реакциях образования супрамолекулярных соединений.	12	2		2	8	
<b>Тема 3.</b> Комплементарность молекулярной информации реагентов на уровне их взаимодействия.	12	2		2	8	
<b>Тема 4.</b> Супрамолекулярные взаимодействия.	14	3		3	8	

<b>Тема 5.</b> Супрамолекулярный механизм химических реакций	14	3		3	8	
<b>Тема 6.</b> Супрамолекулярный катализ.	13	3		3	7	
<b>Тема 7.</b> Актуальные направления супрамолекулярной химии.	13	3		3	7	
<b>Итого</b> <i>по содержательному модулю 1</i>	<b>90</b>	<b>18</b>		<b>18</b>	<b>54</b>	

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

Практические занятия не предусмотрены учебным планом

### ТЕМЫ ЛЕКЦИОННЫХ ЗАНЯТИЙ

<b>№ п/п</b>	<b>Название темы</b>	<b>Количество часов</b>
1.	Супрамолекулярная химия: возникновение, развитие, перспективы.	2
2.	Молекулярное распознавание реагентов в реакциях образования супрамолекулярных соединений.	2
3.	Комплементарность молекулярной информации реагентов на уровне их взаимодействия.	2
4.	Супрамолекулярные взаимодействия.	3
5.	Супрамолекулярный механизм химических реакций	3
6.	Супрамолекулярный катализ.	3
7.	Актуальные направления супрамолекулярной химии.	3
	<b>ВСЕГО</b>	<b>18</b>

### ТЕМЫ ЛАБОРАТОРНЫХ ЗАНЯТИЙ

<b>№ п/п</b>	<b>Название темы</b>	<b>Количество часов</b>
1.	Методология квантово-химического расчета динамической структуры супрамолекулярных соединений.	2
2.	Методология молекулярного моделирования супрамолекулярных наноассоциатов.	2
3.	Динамическая комплементарность реагентов в процессе образования супрамолекулярных соединений.	2
4.	Хелатный эффект в процессе образования супрамолекулярных соединений.	2
5.	Макроциклический эффект в процессе образования супрамолекулярных соединений.	2
6.	Методология темплатного молекулярного моделирования супрамолекулярных ассоциатов	2



7.	2D докирование реагентов в процессе образования супрамолекулярных соединений.	2
8.	3D докирование реагентов в процессе образования супрамолекулярных соединений.	2
9.	Термодинамические параметры ассоциации реагентов в процессе образования супрамолекулярных соединений.	2
	<b>ВСЕГО</b>	<b>18</b>

## 6. МЕТОДИЧЕСКИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ ПО ОРГАНИЗАЦИИ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ СТУДЕНТОВ.

### ОРГАНИЗАЦИЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ СТУДЕНТОВ

<b>№ п/п</b>	<b><i>Название темы</i></b>	<b><i>Количество часов</i></b>
1.	Супрамолекулярная химия: возникновение, развитие, перспективы.	8
2.	Молекулярное распознавание реагентов в реакциях образования супрамолекулярных соединений.	8
3.	Комплементарность молекулярной информации реагентов на уровне их взаимодействия.	8
4.	Супрамолекулярные взаимодействия.	8
5.	Супрамолекулярный механизм химических реакций	8
6.	Супрамолекулярный катализ.	7
7.	Актуальные направления супрамолекулярной химии.	7
	<b>ВСЕГО</b>	<b>54</b>

## 7. ИНДИВИДУАЛЬНЫЕ ЗАДАНИЯ (не предусмотрены программой)

## 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 МОДУЛЬНОГО КОНТРОЛЯ

### ГОУ ВПО «ДОНЕЦКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

Химический факультет

*Направление подготовки:* **04.03.01 Химия**  
*Программа подготовки:* **бакалавриат**  
*Семестр* **7**  
*Учебная дисциплина* **Супрамолекулярная химия**

### МОДУЛЬНАЯ КОНТРОЛЬНАЯ РАБОТА ВАРИАНТ №1

1. Супрамолекулярные каталитические реакции.
2. Химическая активация реагентов супрамолекулярных реакций.
3. Основные этапы химической активации реагентов супрамолекулярных реакций

Утверждено на заседании кафедры физической химии,  
протокол № \_\_\_\_ от « \_\_\_\_ » \_\_\_\_\_ 20 \_\_\_\_ г.

Заведующий кафедрой  
Преподаватель

\_\_\_\_\_  
\_\_\_\_\_  
В.М. Михальчук  
Н.А. Туровский

#### Критерии оценивания модульного контроля

<i>Номер задания</i>	<i>Количество баллов</i>
1	15
2	15
3	15
<b>Всего</b>	45

## 10. ОБРАЗЕЦ БИЛЕТА (зачет)

### *Теоретические вопросы к зачету*

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.

**Образец билета (зачет)**

**ГОУ ВПО «ДОНЕЦКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»**  
Химический факультет

Направление подготовки: **04.03.01 Химия**  
 Программа подготовки: **бакалавриат**  
 Семестр: **7**  
 Учебная дисциплина: **Супрамолекулярная химия**

**БИЛЕТ № 1 (зачет)**

1. Постулат Дениела Кошланда о механизме ферментативных реакций.
2. Ключевая концепция супрамолекулярной химии.
3. Необходимые предпосылки появления супрамолекулярной химии.

Утверждено на заседании кафедры физической химии  
 Протокол № от «    » 20\_\_ г.

Заведующий кафедрой \_\_\_\_\_ проф. Михальчук В.М.

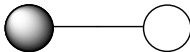
Преподаватель \_\_\_\_\_ доц. Туровский Н.А.

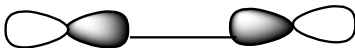
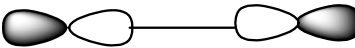
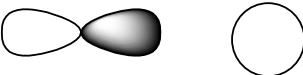
**Критерии оценивания экзамена**

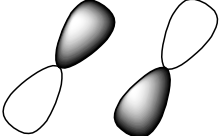
<b>Номер задания</b>	<b>Количество баллов</b>
1	15
2	15
3	20
<b>Всего</b>	<b>50 баллов</b>

**11. ОБРАЗЕЦ ТЕСТОВОГО ЗАДАНИЯ**

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

1.	Проанализировать структуру МО ( $\psi_2$ ) $\psi_2 = \dots - c_{21}\varphi_{Sx(A)} + c_{22}\varphi_{Px(B)} + \dots$ и определить тип вклада s и p – АО, которые центрированы на атомах А и В, в образование химической связи. а. связывающий вклад; б. антисвязывающий вклад; в. несвязывающий вклад.	
2.	S АО центрированы на атомах А и В и образуют ... комбинацию. <div align="center">  </div> Выбрать компоненты $c_{21}\varphi_{S(A)}$ и $c_{22}\varphi_{S(B)}$ МО контролирующей эту хи-	

	<p>мическую связь:</p> $\Psi_2 = \dots c_{21}\varphi_{S(A)} \dots c_{22}\varphi_{S(B)} +$ <p>а. связывающую;  б. антисвязывающую;  в. несвязывающую.  г. <math>-c_{21}\varphi_{S(A)}</math>;  д. <math>+c_{21}\varphi_{S(A)}</math>;  е. <math>-c_{22}\varphi_{S(B)}</math>;  ж. <math>+c_{22}\varphi_{S(B)}</math>.</p>	
3.	<p>р<sub>x</sub> АО центрированы на атомах А и В и образуют ... комбинацию</p>  <p>Выбрать компоненты <math>c_{21}\varphi_{p_x(A)}</math> и <math>c_{22}\varphi_{p_x(B)}</math> МО контролирующей эту химическую связь:</p> $\Psi_2 = \dots c_{21}\varphi_{p_x(A)} \dots c_{22}\varphi_{p_x(B)} +$ <p>а. связывающую;  б. антисвязывающую;  в. несвязывающую.  г. <math>-c_{21}\varphi_{p_x(A)}</math>;  д. <math>+c_{21}\varphi_{p_x(A)}</math>;  е. <math>-c_{22}\varphi_{p_x(B)}</math>;  ж. <math>+c_{22}\varphi_{p_x(B)}</math>.</p>	
4.	<p>р<sub>x</sub> АО центрированы на атомах А и В и образуют ... комбинацию</p>  <p>Выбрать компоненты <math>c_{21}\varphi_{p_x(A)}</math> и <math>c_{22}\varphi_{p_x(B)}</math> МО контролирующей эту химическую связь:</p> $\Psi_2 = \dots c_{21}\varphi_{p_x(A)} \dots c_{22}\varphi_{p_x(B)} +$ <p>а. связывающую;  б. антисвязывающую;  в. несвязывающую.  г. <math>-c_{21}\varphi_{p_x(A)}</math>;  д. <math>+c_{21}\varphi_{p_x(A)}</math>;  е. <math>-c_{22}\varphi_{p_x(B)}</math>;  ж. <math>+c_{22}\varphi_{p_x(B)}</math>.</p>	
5.	<p>р<sub>x</sub> и s АО центрированы на атомах А и В и образуют ... комбинацию</p>  <p>Выбрать компоненты <math>c_{21}\varphi_{p_x(A)}</math> и <math>c_{22}\varphi_{s(B)}</math> 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;</p>	

	<p>В. несвязывающую.</p> <p>Г. <math>-c_{21}\varphi_{px(A)}</math>;</p> <p>Д. <math>+c_{21}\varphi_{px(A)}</math>;</p> <p>Е. <math>-c_{22}\varphi_{s(B)}</math>;</p> <p>Ж. <math>+c_{22}\varphi_{s(B)}</math>.</p>	
6.	<p><math>P_z</math> АО центрированы на атомах А и В и образуют ... <math>\pi</math>-комбинацию</p>  <p>Выбрать компоненты <math>c_{21}\varphi_{pz(A)}</math> и <math>c_{22}\varphi_{pz(B)}</math> МО контролирующей эту химическую связь:</p> $\Psi_2 = \dots c_{21}\varphi_{pz(A)} \dots c_{22}\varphi_{pz(B)} +$ <p>а. связывающую;</p> <p>б. антисвязывающую;</p> <p>в. несвязывающую.</p> <p>Г. <math>-c_{21}\varphi_{pz(A)}</math>;</p> <p>Д. <math>+c_{21}\varphi_{pz(A)}</math>;</p> <p>Е. <math>-c_{22}\varphi_{pz(B)}</math>;</p> <p>Ж. <math>+c_{22}\varphi_{pz(B)}</math>.</p>	
7.	<p>Химическая система будет в состоянии равновесия, если суммарные силы Гельмана – Фейнмана действующие на каждый ее атом будут ...:</p> <p>а. максимальные;</p> <p>б. минимальные;</p> <p>в. равны нулю;</p> <p>г. отрицательные.</p>	

## 12. КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ

*Распределение баллов, которые могут получить студенты  
в процессе изучения дисциплины*

Организационно-учебная работа студента	Текущий контроль	Всего
	<p>Тестирование</p> <p>Письменные работы: практические задания, задания репродуктивного уровня, задания для домашней работы, контрольные работы</p> <p>Задания к лабораторным работам</p> <p>Устное собеседование.</p>	<b>50 баллов</b>
max 5 баллов	max 45 баллов	

**Шкала соответствия баллов национальной шкале**

Сумма баллов по 100 балльной шкале	По шкале ECTS	По государственной шкале	При оценке экзамена преподаватель руководствуется следующими принципами
90–100	A	«Отлично» (5)	показаны систематические и глубокие знания при ответе на все вопросы билета, понимание физической сущности проблемы
80–89	B	«Хорошо» (4)	показаны систематические и глубокие знания при ответе на все вопросы билета, понимание физической сущности проблемы, но при ответе допущены некоторые ошибки и неточности
75–79	C		показаны систематические знания при ответе на все вопросы билета, но при ответе допущены некоторые ошибки и неточности
70–74	D	«Удовлетворительно» (3)	показаны несистематические и неглубокие знания при ответе на вопросы билета, при ответе допущено несколько ошибок, исправленных самим студентом
60–69	E		поверхностные знания при ответе на вопросы билета, допущено ряд неточностей, которые студент не в состоянии самостоятельно исправить
35–59	FX	«Неудовлетворительно» с возможностью повторной аттестации (2)	нет ответов на основные вопросы билета, нет ответов на дополнительные и наводящие вопросы
0-34	F	«Неудовлетворительно» (2) с возможностью повторной сдачи при условии обязательного набора дополнительных баллов	выполнение менее 30 % обязательных заданий; неумение раскрыть основное содержание задания; неспособность формулировать выводы.

### 13. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ УЧЕБНОГО ПРОЦЕССА

Лекционные занятия проводятся в аудитории оборудованной меловой доской, мультимедийным проектором и экраном. Лабораторные занятия проводятся в компьютерном классе: 10 персональных компьютеров. Дополнительное обеспечение: Wi-Fi доступ в корпусах университета, текстовые и электронные ресурсы Научной библиотеки университета.

### 14. РЕКОМЕНДОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

№	Наименование	Кол-во экземпляров в	Наличие электронной версии
---	--------------	----------------------	----------------------------

		библио- теке ДонНУ	в ЭБС
	<b>Основная</b>		
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	+
	<b>Дополнительная</b>		
5.	Supramolecular reaction of lauroylperoxide with tetraalkylammonium Bromides /N.A. Turovskij at. al. // Oxidation Communications. – 2010. – Vol. 33, № 3. – P. 485-501. <a href="http://repo.donnu.ru:8080/jspui/handle/123456789/4318">http://repo.donnu.ru:8080/jspui/handle/123456789/4318</a>	Электронный ресурс	+
6.	Supramolecular Decomposition of the Aralkyl Hydroperoxides in the Presence of Et <sub>4</sub> NBr [Электронный ресурс] / 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 : Special Topics. – P. 270-285. – Электрон. текстовые дан. – Режим доступа: <a href="http://repo.donnu.ru:8080/jspui/handle/123456789/4324">http://repo.donnu.ru:8080/jspui/handle/123456789/4324</a>	Электронный ресурс	+

## 15. ИНФОРМАЦИОННЫЕ РЕСУРСЫ

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

## 16. ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ

(при наличии. **Обязательное наличие лицензии** или личные авторские разработки)

1. Windows 7 PRO (корпоративная лицензия ДонНУ лицензия №46484614);
2. Microsoft Office ((корпоративная лицензия ДонНУ лицензия №46472919);
3. МОРАС 2016 – комплекс программ структурной химии (программа доступа бесплатно для академического, некоммерческого использования. Академическая лицензия).
4. Microsoft Visual Studio (лицензия программы DreamSpark для высших учебных заведений);
5. Лицензия GPL, Apach, BSD для свободного программного обеспечения:
  - Антивирус Касперского;
  - Adobe Acrobat Reader.



Рабочая программа рассмотрена и переутверждена на заседании кафедры физической химии с изменениями (без изменений) на \_\_\_\_\_ год.  
Протокол № \_\_\_\_\_ от « \_\_\_\_\_ » \_\_\_\_\_ г.

Заведующий кафедрой \_\_\_\_\_ В.М. Михальчук