

Министерство науки и высшего образования РФ  
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение  
высшего образования  
«СИБИРСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»  
**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)**

Б1.В.01.ДВ.01.02 МАТЕМАТИЧЕСКИЙ И  
ЕСТЕСТВЕННОНАУЧНЫЙ ЦИКЛ  
Молекулярный дизайн

наименование дисциплины (модуля) в соответствии с учебным планом

Направление подготовки / специальность

04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

Направленность (профиль)

04.05.01.31 Физическая химия

Форма обучения

очная

Год набора

2021

Красноярск 2022

## **РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)**

Программу составили \_\_\_\_\_

---

должность, инициалы, фамилия

## 1 Цели и задачи изучения дисциплины

### 1.1 Цель преподавания дисциплины

Цель преподавания дисциплины – получение знаний в ряде специальных областей органической химии и формировании целостного представления об актуальных проблемах органической химии и способах их решения.

### 1.2 Задачи изучения дисциплины

Задачи изучения дисциплины: знакомство со сложившимися областями молекулярного дизайна структурно-ориентированной и функционально-ориентированной.

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

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Запланированные результаты обучения по дисциплине
<b>ПК-2: Способен проводить патентно-информационные исследования в выбранной области химии и / или смежных наук</b>	
ПК-2.1: Проводит поиск специализированной информации в патентно-информационных базах данных	
ПК-2.2: Анализирует и обобщает результаты патентного поиска по тематике проекта в выбранной области химии (химической технологии)	
<b>УК-1: Способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, выработать стратегию действий</b>	
УК-1.1: Анализирует проблемную ситуацию как систему, выявляя ее составляющие и связи между ними	
УК-1.2: Определяет пробелы в информации, необходимой для решения проблемной ситуации, и проектирует процессы по их устранению	
УК-1.3: Критически оценивает надежность источников информации, работает с противоречивой информацией из разных источников	

<p>УК-1.4: Разрабатывает и содержательно аргументирует стратегию решения проблемной ситуации на основе системного и междисциплинарного подходов</p>	
<p>УК-1.5: Использует логико-методологический инструментарий для критической оценки современных концепций философского и социального характера в своей предметной области</p>	

#### **1.4 Особенности реализации дисциплины**

Язык реализации дисциплины: Русский.

Дисциплина (модуль) реализуется без применения ЭО и ДОТ.

## 2. Объем дисциплины (модуля)

Вид учебной работы	Всего, зачетных единиц (акад. час)	е
		1
<b>Контактная работа с преподавателем:</b>	<b>1,44 (52)</b>	
занятия лекционного типа	0,5 (18)	
практические занятия	0,94 (34)	
<b>Самостоятельная работа обучающихся:</b>	<b>0,56 (20)</b>	
курсовое проектирование (КП)	Нет	
курсовая работа (КР)	Нет	

### 3 Содержание дисциплины (модуля)

#### 3.1 Разделы дисциплины и виды занятий (тематический план занятий)

		Контактная работа, ак. час.							
№ п/п	Модули, темы (разделы) дисциплины	Занятия лекционного типа		Занятия семинарского типа				Самостоятельная работа, ак. час.	
				Семинары и/или Практические занятия		Лабораторные работы и/или Практикумы			
		Всего	В том числе в ЭИОС	Всего	В том числе в ЭИОС	Всего	В том числе в ЭИОС	Всего	В том числе в ЭИОС
<b>1.</b>									
	1. Краун-эфиры. История открытия краун-эфиров. Строение и номенклатура краун-эфиров. Типы краун-эфиров. Дизайн краун-эфиров: разработка путей и методов их синтеза. Синтез краун-эфиров, содержащих азот и серу. Физические свойства краун-эфиров. Комплексообразующие свойства краун-эфиров. Зависимость комплексообразующих свойств краун-эфиров от размера и формы краун-эфиров.	2							
	2. Природные макрогетероциклы. Полимеры со встроенными краун-эфирными фрагментами.			4					

<p>3. Применение краун-эфиров. Строение комплексов краун-эфиров со щелочными и щелочноземельными металлами. Определение констант устойчивости комплексов. Реорганизация краун-эфиров при комплексообразовании. Краун-эфиры, сопротивляющиеся реорганизации. Комплексы краун-эфиров с металлами в нулевой степени окисления. Переключаемые краун-эфиры: транспорт ионов через мембраны. Применение краун-эфиров для селективного захвата, 2разделения и транспорта катионов. Применение краун-эфиров в качестве реагентов и сореагентов в органическом синтезе и межфазном катализе. Получение материалов на основе краун-эфиров с необычными свойствами.</p>	2							
<p>4. Криптанды: цель создания, строение и номенклатура. Концепция создания лигандов, содержащих жёсткую трёхмерную матрицу с размещённой на ней системой комплексообразующих сайтов. Комплексообразующие свойства криптандов. Зависимость их комплексообразующей способности от строения. Синтез ловушек для органических молекул. Применение криптандов.</p>	2							
<p>5. Сферанды и карцеранды. Методология создания: матричный эффект при получении карцерандов. Химия изолированных молекул внутри молекулярных камер</p>			4					

<p>6. История открытия фуллеренов. Физические свойства фуллеренов: новая модификация углерода. Современные методы синтеза фуллеренов Химические свойства фуллеренов. Проблемы дизайна в области создания производных фуллеренов с заданными свойствами: перфторированные фуллерены, водорастворимые фуллерены, металлоорганические производные фуллеренов. Области применения фуллеренов и их производных</p>	2							
<p>7. История возникновения супрамолекулярной химии. Химия молекулярных ансамблей. Принципы образования супермолекул. Принципы комплементарности и самоорганизации молекул. Создание искусственных абиотических систем: изучение энергетики и стереохимии нековалентных межмолекулярных взаимодействий (электростатических сил, водородных связей, взаимодействий Ван-дер-Ваальса) в пределах определённого молекулярного ансамбля. Достижения супрамолекулярной химии в области создания селективных мелаллокомплексных каталитических систем для органического и нефтехимического синтеза.</p>	2							



<p>8. Циклодекстрины и каликсарены. Строение и физические свойства каликсаренов и циклодекстринов. Супрамолекулярные комплексы с участием каликсаренов и циклодекстринов. Катализ химических процессов на основе комплексов «гость-хозяин» с участием каликсаренов и циклодекстринов. Регио- и стереоселективность реакций окисления, восстановления, гидроксирования. Модификация циклодекстринов. Кукурбитурил – строительный блок в синтезе супермолекул. Обратимое включение «гостей» в полость молекул-«хозяев» и проблема транспорта веществ.</p>	2							
<p>9. Платоновы углеводороды. Кубан. Полициклические молекулы каркасного типа. Молекулы, имеющие форму правильных многогранников. Синтез кубана: стратегия и тактика синтеза. Физические свойства кубана и его реакционная способность. Создание олигомеров на основе кубана: молекулы-стержни. Синтез и пути использования производных кубана. Додекаэдран История дизайна и синтеза додекаэдрана. Альтернативные планы синтеза додекаэдрана. Причины уникальности химических свойств додекаэдрана: передача влияния через пространство.</p>	2							
<p>10. Тетраэдран: проблемы синтеза и их решение. Причины стабильности ряда производных тетраэдрана. Химические свойства производных тетраэдрана. Несоответствие традиционных теоретических представлений о способах стабилизации карбокатионов и экспериментальных данных связанных с химическими свойствами Платоновых углеводородов.</p>			8					

<p>11. Общий стратегический принцип синтеза дендримеров. Классические подходы в конструирования сфероидных макромолекул. Причины осложнений, возникающие в ходе реального синтеза сконструированных молекул.</p> <p>Пространственное ограничение звездообразного роста молекулы как преимущество в синтезе на основе специально организованной анионной поликонденсации. Способ синтеза дендримеров от периферии к центру. Древовидные арборолы.</p>	2							
<p>12. Характеристика гомогенности промежуточных продуктов в синтезе дендримеров и доказательство их строения. Сравнение свойств дендримеров и обычных полимеров. Области применения дендримеров. Области применения дендримеров.</p>			8					
<p>13. Аномальные структуры против классической теории. Искажение конфигурации тетраэдрического атома углерода: выплющенный и пирамидализованный углерод. Синтез фенестранов: трудности на пути синтеза и проблемы их преодоления. Бензоаннелированные аналоги фенестрана. Молекулярный дизайн в области соединений, содержащих пирамидализованный атом углерода.</p>	2							
<p>14. Пропеллан и его производные. Двойная связь и способы её искажения. Циклопропен и его производные</p>			10					
<p>15. Проработка лекционного и теоретического материала, подготовка к зачету.</p>							20	

<p>16. оценка «зачтено» выставляется обучающемуся, если в ответе верно изложено не менее 70 % материала и не допущено существенных неточностей; оценка «не зачтено» выставляется обучающемуся, который не знает значительной части (более 30 %) теоретического материала и допускает существенные ошибки.</p>								
<p>Всего</p>	<p>18</p>		<p>34</p>				<p>20</p>	

## **4 Учебно-методическое обеспечение дисциплины**

### **4.1 Печатные и электронные издания:**

1. Травень В. Ф. Органическая химия: Т. 1: в 2-х т. : учебник для вузов по направлению "Химическая технология и биотехнология" и химико-технологическим направлениям подготовки дипломированных специалистов(Москва: Академкнига).
2. Травень В. Ф. Органическая химия: Т. 2: в 2-х т. : учебник для вузов по направлению "Химическая технология и биотехнология" и химико-технологическим направлениям подготовки дипломированных специалистов(Москва: Академкнига).
3. Резников В. А., Тихонов А. Я., Федотова Т. Д. Химия в НГУ. Органическая химия: учебное пособие для студентов вузов (Новосибирск: НГУ).
4. Березин Б. Д., Березин Д. Б. Органическая химия: учебное пособие для бакалавров(Москва: Юрайт).
5. Илиел Э. Л., Вайлен С., Дойл М., Бредихин А. А. Основы органической стереохимии: перевод с английского(Москва: БИНОМ, Лаборатория знаний).
6. Грачева Е. В., Зыкова И. Д., Лопатин В. Е., Милькова И. А., Панкова М. В., Фоменко Л. В. Химия. Органическая химия: практикум(Красноярск: ИПЦ КГТУ).
7. Бакстон Ш. Р., Робертс С. М. Введение в стереохимию органических соединений: от метана до макромолекул: перевод с английского(Москва: Мир).
8. Илиел Э. Л., Потапов В. М. Основы стереохимии: пер. с англ.(Москва: Мир).

### **4.2 Лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение, в том числе отечественного производства (программное обеспечение, на которое университет имеет лицензию, а также свободно распространяемое программное обеспечение):**

1. Microsoft Office Professional Plus 2007.
2. Приложения ChemOffice Ultra 11 - пакет утилит для химиков, таких как: ChemDraw, Chem3D, ChemFinder, ChemACX

### **4.3 Интернет-ресурсы, включая профессиональные базы данных и информационные справочные системы:**

1. Научная Электронная Библиотека e-LIBRARY.RU. Полнотекстовая коллекция «Российские академические журналы on-line» (издательство «Наука») включает 139 журналов. Заключено лицензионное соглашение (до ноября 2021 г.) об использовании ресурсов со свободным доступом с компьютеров университетской сети. – Режим доступа: <http://elibrary.ru/>.
2. Nature Publishing Group – годовая подписка на научные электронные журналы издательства Nature Publishing Group: Nature Materials, Nature Nanotechnology. – Режим доступа: <http://www.nature.com>.

3. EBSCO Journals (компания EBSCO Publishing) – электронные журналы. Всего более 7000 названий журналов, 3,5 тысячи рецензируемых журналов. – Режим доступа: <http://search.ebscohost.com>
4. Cambridge University Press - доступ к текущим выпускам журналов издательств Cambridge University Press (с 1996-2015 гг) . – Режим доступа: <http://www.journals.cambridge.org>
5. Royal Society of Chemistry. – Режим доступа: <http://www.rsc.org>
6. Elsevier - доступ к Freedom Collection издательства Elsevier. В комплект подписки Freedom Collection издательства Elsevier входят электронные научные полнотекстовые журналы по всем областям науки, техники, медицины, размещенные на платформе ScienceDirect, (23 предметные коллекции), охват более 1900 названий журналов. Архив 2010-2014 гг. . – Режим доступа: <http://www.sciencedirect.com>
7. 7. Электронная химическая энциклопедия – он-лайн. . – Режим доступа: <http://www.xumuk.ru/encyklopedia/>.
8. 8. Сайт по применению методов математической статистики и теории вероятностей в аналитической химии для обработки результатов аналитических измерений. – Режим доступа: <http://chemstat.com.ru/>
9. 9.Справочник по химии: основные понятия, термины, законы, схемы, формулы, справочный материал, графики / Л. Н. Блинов, И. Л. Перфилова; Санкт-Петербургский политехнический университет. - Москва: Проспект, 2010. - 155 с.
10. 10.Электронно-библиотечная система Znanium.com предоставляет зарегистрированным пользователям круглосуточный доступ к электронным изданиям из любой точки мира посредством сети Интернет. – Режим доступа <http://znanium.com/>

## **5 Фонд оценочных средств**

Оценочные средства находятся в приложении к рабочим программам дисциплин.

## **6 Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)**

Для чтения лекций используется аудитория, оборудованная мультимедийным оборудованием. Практические занятия проводятся в учебной аудитории с использованием доски.