

Министерство науки и высшего образования РФ  
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение  
высшего образования  
«СИБИРСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

**СОГЛАСОВАНО**

Заведующий кафедрой

Кафедра органической и  
аналитической химии  
(ОиАХ\_ХМФ)

наименование кафедры

подпись, инициалы, фамилия

«\_\_\_» \_\_\_\_\_ 20\_\_ г.

институт, реализующий ОП ВО

**УТВЕРЖДАЮ**

Заведующий кафедрой

Кафедра органической и  
аналитической химии  
(ОиАХ\_ХМФ)

наименование кафедры

Б.Н. Кузнецов

подпись, инициалы, фамилия

«\_\_\_» \_\_\_\_\_ 20\_\_ г.

институт, реализующий дисциплину

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ**  
**МАТЕМАТИЧЕСКИЙ И**  
**ЕСТЕСТВЕННОНАУЧНЫЙ ЦИКЛ**  
**МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ДИЗАЙН**

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

Направление подготовки /  
специальность \_\_\_\_\_

Направленность  
(профиль) \_\_\_\_\_

Форма обучения

очная

Год набора

2019

Красноярск 2021

## РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

составлена в соответствии с Федеральным государственным образовательным стандартом высшего образования с учетом профессиональных стандартов по укрупненной группе

040000 «ХИМИЯ»

---

Направление подготовки /специальность (профиль/специализация)

04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия, специализация

---

04.05.01.31 Физическая химия

---

Программу  
составили

---

## 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

<b>УК-1:Способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, выработать стратегию действий</b>
--

<b>ПК-2:Способен проводить патентно-информационные исследования в выбранной области химии и / или смежных наук</b>
--

1.4 Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы

Дисциплина является вариативной. Для её изучения необходимо усвоение дисциплин: «Общая и неорганическая химия», «Химическая термодинамика», «Химическая кинетика», «Органическая химия»

Коллоидная химия  
Химическая технология  
Химическое материаловедение

### 1.5 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)	Семестр
		8
<b>Общая трудоемкость дисциплины</b>	<b>2 (72)</b>	<b>2 (72)</b>
<b>Контактная работа с преподавателем:</b>	<b>1,44 (52)</b>	<b>1,44 (52)</b>
занятия лекционного типа	0,5 (18)	0,5 (18)
занятия семинарского типа		
в том числе: семинары		
практические занятия	0,94 (34)	0,94 (34)
практикумы		
лабораторные работы		
другие виды контактной работы		
в том числе: групповые консультации		
индивидуальные консультации		
иная внеаудиторная контактная работа:		
групповые занятия		
индивидуальные занятия		
<b>Самостоятельная работа обучающихся:</b>	<b>0,56 (20)</b>	<b>0,56 (20)</b>
изучение теоретического курса (ТО)		
расчетно-графические задания, задачи (РГЗ)		
реферат, эссе (Р)		
курсовое проектирование (КП)	Нет	Нет
курсовая работа (КР)	Нет	Нет
<b>Промежуточная аттестация (Зачёт)</b>		

### 3 Содержание дисциплины (модуля)

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

№ п/п	Модули, темы (разделы) дисциплины	Занятия лекционного типа (акад. час)	Занятия семинарского типа		Самостоятельная работа, (акад. час)	Формируемые компетенции
			Семинары и/или Практические занятия (акад. час)	Лабораторные работы и/или Практикумы (акад. час)		
1	2	3	4	5	6	7
1		18	34	0	20	
Всего		18	34	0	20	

#### 3.2 Занятия лекционного типа

№ п/п	№ раздела дисциплины	Наименование занятий	Объем в акад. часах		
			Всего	в том числе, в инновационной форме	в том числе, в электронной форме
1	1	Краун-эфир. 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	0

2	1	<p>Применение краун-эфиров. Строение комплексов краун-эфиров со щелочными и щелочноземельными металлами.</p> <p>Определение констант устойчивости комплексов.</p> <p>Реорганизация краун-эфиров при комплексообразовании.</p> <p>Краун-эфиры, сопротивляющиеся реорганизации.</p> <p>Комплексы краун-эфиров с металлами в нулевой степени окисления.</p> <p>Переключаемые краун-эфиры: транспорт ионов через мембраны.</p> <p>Применение краун-эфиров для селективного захвата, 2разделения и транспорта катионов.</p> <p>Применение краун-эфиров в качестве реагентов и сореагентов в органическом синтезе и межфазном катализе.</p> <p>Получение материалов на основе краун-эфиров с необычными свойствами.</p>	2	0	0
---	---	---	---	---	---

3	1	<p>Криптанды: цель создания, строение и номенклатура.          Концепция создания лигандов, содержащих жёсткую трёхмерную матрицу с размещённой на ней системой комплексоующих сайтов.          Комплексообразующие свойства криптантов.          Зависимость их комплексообразующей способности от строения. Синтез ловушек для органических молекул.          Применение криптантов.</p>	2	2	0
4	1	<p>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	0	0

5	1	<p>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	2	0
---	---	---	---	---	---



6	1	<p>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	0	0
---	---	--	---	---	---

7	1	<p>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	0	0
---	---	--	---	---	---

8	1	<p>Общий стратегический принцип синтеза дендримеров.</p> <p>Классические подходы в конструирования сфероидных макромолекул.</p> <p>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.</p> <p>Способ синтеза дендримеров от периферии к центру.</p> <p>Древовидные арборолы.</p>	2	0	0
9	1	<p>Аномальные структуры против классической теории. Искажение конфигурации тетраэдрического атома углерода: выплющенный и пирамидализированный углерод. Синтез фенестранов: трудности на пути синтеза и проблемы их преодоления.</p> <p>Бензоаннелированные аналоги фенестрана.</p> <p>Молекулярный дизайн в области соединений, содержащих пирамидализированный атом углерода.</p>	2	0	0
Итого			18	6	0

### 3.3 Занятия семинарского типа

				Объем в акад. часах
--	--	--	--	---------------------

			Всего	в том числе, в инновационной форме	в том числе, в электронной форме
1	1	Природные макрогетероциклы. Полимеры со встроенными краун-эфирными фрагментами.	4	0	0
2	1	Сферанды и карцеранды. Методология создания: матричный эффект при получении карцерандов. Химия изолированных молекул внутри молекулярных камер	4	0	0
3	1	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.	8	0	0
4	1	Характеристика гомогенности промежуточных продуктов в синтезе дендримеров и доказательство их строения. Сравнение свойств дендримеров и обычных полимеров. Области применения дендримеров. Области применения дендримеров.	8	0	0

5	1	Пропеллан и его производные. Двойная связь и способы её искажения. Циклопропен и его производные	10	0	0
Всего			24	0	0

### 3.4 Лабораторные занятия

№ п/п	№ раздела дисциплины	Наименование занятий	Объем в акад. часах		
			Всего	в том числе, в инновационной форме	в том числе, в электронной форме
Всего					

## 5 Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации

Оценочные средства находятся в приложении к рабочим программам дисциплин.

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

6.1. Основная литература			
	Авторы, составители	Заглавие	Издательство, год
Л1.1	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, 2005
Л1.2	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, 2005
Л1.3	Резников В. А., Тихонов А. Я., Федотова Т. Д.	Химия в НГУ. Органическая химия: учебное пособие для студентов вузов	Новосибирск: НГУ, 2011
Л1.4	Березин Б. Д., Березин Д. Б.	Органическая химия: учебное пособие для бакалавров	Москва: Юрайт, 2012
6.2. Дополнительная литература			

	Авторы, составители	Заглавие	Издательство, год
Л2.1	Илиел Э. Л., Вайлен С., Дойл М., Бредихин А. А.	Основы органической стереохимии: перевод с английского	Москва: БИНОМ, Лаборатория знаний, 2007
Л2.2	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, 2006
Л2.3	Бакстон Ш. Р., Робертс С. М.	Введение в стереохимию органических соединений: от метана до макромолекул: перевод с английского	Москва: Мир, 2005
Л2.4	Илиел Э. Л., Потапов В. М.	Основы стереохимии: пер. с англ.	Москва: Мир, 1971

## **8 Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)**

Самостоятельная работа реализуется через изучение теоретического материала по литературе, рекомендуемой лектором после каждой лекции.

1. Горностаев, Л.М. Физико-химические методы исследования хинонов и хиноидных соединений: Методическое пособие к лабораторным работам /Л.М. Горностаев, Т.И. Лаврикова, Е.В. Арнольд, Н.А. Булгакова. – Красноярск: КГПУ, 2012.

2. Когай, Т.И. Синтез органических соединений: Метод. указания к лабораторным занятиям по органической химии / Т.И. Когай, Н.Ю. Васильева. – Красноярск: КГУ, 2005.

3. Строение и реакционная способность органических соединений:

Метод. указания к самостоятельной работе / Н.Ю. Васильева. – Красноярск: КГУ, 2001.

## **9 Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю) (при необходимости)**

### **9.1 Перечень необходимого программного обеспечения**

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

## 9.2 Перечень необходимых информационных справочных систем

9.2.1	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: <a href="http://elibrary.ru/">http://elibrary.ru/</a> .
9.2.2	2. Nature Publishing Group – годовая подписка на научные электронные журналы издательства Nature Publishing Group: Nature Materials, Nature Nanotechnology. – Режим доступа: <a href="http://www.nature.com">http://www.nature.com</a> .
9.2.3	3. EBSCO Journals (компания EBSCO Publishing) – электронные журналы. Всего более 7000 названий журналов, 3,5 тысячи рецензируемых журналов. – Режим доступа: <a href="http://search.ebscohost.com">http://search.ebscohost.com</a>
9.2.4	4. Cambridge University Press - доступ к текущим выпускам журналов издательств Cambridge University Press (с 1996-2015 гг) . – Режим доступа: <a href="http://www.journals.cambridge.org">http://www.journals.cambridge.org</a>
9.2.5	5. Royal Society of Chemistry. – Режим доступа: <a href="http://www.rsc.org">http://www.rsc.org</a>
9.2.6	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: <a href="http://www.sciencedirect.com">http://www.sciencedirect.com</a>
9.2.7	7. Электронная химическая энциклопедия – он-лайн. . – Режим доступа: <a href="http://www.xumuk.ru/encyklopedia/">http://www.xumuk.ru/encyklopedia/</a> .
9.2.8	8. Сайт по применению методов математической статистики и теории вероятностей в аналитической химии для обработки результатов аналитических измерений. – Режим доступа: <a href="http://chemstat.com.ru/">http://chemstat.com.ru/</a>
9.2.9	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.
9.2.10	10. Электронно-библиотечная система Znanium.com предоставляет зарегистрированным пользователям круглосуточный доступ к электронным изданиям из любой точки мира посредством сети Интернет. – Режим доступа <a href="http://znanium.com/">http://znanium.com/</a>

## 10 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.