

КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

Навчально науковий інститут високих технологій

кафедра супрамолекулярної хімії



РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Молекулярний дизайн

(повна назва навчальної дисципліни)

для студентів

галузь знань 10 Природничі науки
(шифр і назва)
спеціальність **105 Прикладна фізика та наноматеріали**
(шифр і назва спеціальності)
освітній рівень **магістр**
(молодший бакалавр, бакалавр, магістр)
освітня програма **Високі технології (прикладна фізика та наноматеріали)**
(назва освітньої програми)
вид дисципліни Вибіркова
вид дисципліни вибіркова

Форма навчання _____ денна
Навчальний рік 2022/2023
Семестр 3
Кількість кредитів ECTS 3
Мова викладання, навчання та оцінювання українська
Форма заключного контролю екзамен

Викладач: д.х.н., проф. Комаров І.В.

(Науково-педагогічні працівники, які забезпечують викладання даної дисципліни у відповідному навчальному році)

Пролонговано: на 20__/20__ н.р. _____ (_____) «__» 20__ р.
(підпис, ПІБ, дата)


на 20__/20__ н.р. _____ (_____) «__» 20__ р.
(підпис, ПІБ, дата)

КИЇВ – 2022

Розробник: д.х.н., проф. Комаров І.В.

ЗАТВЕРДЖЕНО:

Зав. кафедри Рябухін С.В.


(підпис)

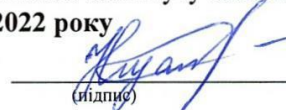
(_____
(прізвище та ініціали)

Протокол № 5 від «09» 04 2022 року

Схвалено науково - методичною комісією Інституту високих технологій

Протокол 4 від «13» 05 2022 року

Голова науково-методичної комісії


(підпис)

(Руденко Н.М.
(прізвище та ініціали)

ВСТУП

1. Мета дисципліни :

Ознайомлення студентів з принципами молекулярного дизайну та основними сучасними підходами до планування складних синтезів органічних сполук, опанування ними стратегії і тактики синтезу хімічних сполук, оволодіння навичками самостійного планування синтезів сполук, які необхідні для медичної хімії, для галузей наук про сучасні матеріали, пошуку альтернативних джерел енергії.

2. Попередні вимоги до опанування або вибору навчальної дисципліни :

Студент повинен знати:

фундаментальні основи загальної, неорганічної та органічної хімії, молекулярної біології, фізичної хімії та супрамолекулярної хімії, а також основ фізичних методів дослідження.

Студент повинен вміти:

Користуватися сучасними електронними базами даних в галузі хімії.

3. Анотація навчальної дисципліни

Курс з дисципліни «молекулярний дизайн» поділяється на розділи. У першому розділі після викладення історії виникнення відповідної галузі науки основна увага приділяється молекулярному дизайну. На яскравих прикладах, використовуючи останні досягнення науки продемонстровано як можна сконструювати сполуки, цікаві з теоретичної точки зору чи для їх використання як каталізаторів, реагентів, барвників і т.п. Другий розділ присвячено в основному плануванню, стратегії та тактиці органічного синтезу сполук, для яких попередньо проведено дизайн.

4. Завдання (навчальні цілі)

Навчання дисципліні має на меті розвивати у студентів такі компетентності:
ІК. Здатність самостійно ставити та розв'язувати на інноваційному рівні наукові та науково-технічні задачі проблеми у галузі прикладної фізики, нанофізики, наноматеріалознавства та високих технологій, пов'язані із виготовленням, аналізом властивостей, використанням наноматеріалів, проектування та виготовлення наносенсорних систем, що передбачає застосування теоретичних знань та навичок з фізики, математики, інженерії, програмування, вибраних розділів хімії та біології.

ЗК1. Знання та розуміння предметної області та розуміння професійної діяльності.

ЗК2. Здатність спілкуватися державною та іноземною мовами як усно, так і письмово.

ЗК5. Здатність вчитися і оволодівати сучасними знаннями.

ЗК6. Здатність до пошуку, оброблення та аналізу інформації з різних джерел.

ЗК9. Здатність працювати автономно.

ЗК11. Здатність до подальшого навчання, яке значною мірою є автономним та самостійним.

ЗК12. Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу

ЗК13. Здатність розв'язувати складні задачі і проблеми, що потребує оновлення та інтеграції знань, часто в умовах неповної/недостатньої інформації та суперечливих вимог.

ЗК17. Володіння спеціалізованими концептуальними знаннями, набутими у процесі навчання та/або професійної діяльності на рівні новітніх досягнень, які є основою для оригінального мислення та інноваційної діяльності, зокрема в контексті дослідницької роботи.

ФК1. Здатність виконувати аналіз спеціальної літератури, формулювати постановку наукової або науково-технічної задачі, обирати методи та методики, складати програми наукових досліджень та науково-технічних розробок у галузі прикладної фізики та наноматеріалів.

ФК7. Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу, критичного осмислення проблем у професійній діяльності та на межі предметних галузей.

5. Результати навчання за дисципліною:

Результат навчання (1. знати; 2. вміти; 3. комунікація; 4. автономність та відповідальність)		Форми (та/або методи і технології) викладання і навчання	Методи оцінювання та пороговий критерій оцінювання	Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни
Код	Результат навчання			
1.	Знати: 1.1. основні сучасні хімічні реакції, необхідні для планування органічних синтезів, ретросинтетичний аналіз, сучасні технології проведення органічних синтезів у лабораторіях.	Лекції	Контрольні роботи	35%
2.	Вміти: 2.1. розв'язувати проблемні задачі з молекулярного дизайну, планувати синтез органічних сполук будь-якої складності;	Практичні заняття	Контрольні роботи	30%
		Практичні заняття	Контрольні роботи	15%
3.	3.1. Вміти працювати в групі на семінарах та практичних роботах	Практичні заняття	Звіти	10%
4.	4.1. Вміти самостійно працювати з науковою та навчально-методичною літературою, здійснювати пошук та узагальнення науково-технічної інформації, робити презентації, використовуючи прочитаний матеріал.	Самостійна робота	Контрольна робота	10%

6. Співвідношення результатів навчання дисципліни із програмними результатами навчання

Результати навчання дисципліни	1.1	2.1	3.1	4.1
Програмні результати навчання				
1. Володіти поглибленим рівнем знань у прикладній фізиці, наноматеріалознавстві, високих технологіях та споріднених областях, включаючи методики проведення експериментів і технології отримання наноматеріалів, рівень цих знань повинен бути достатнім для проведення наукових досліджень на рівні останніх світових досягнень і направленим на їх розширення та поглиблення.	+	+		
2. Використовувати знання в галузі прикладної фізики, математики, електроніки та інформаційних технологій для виконання наукових досліджень та розв'язання виробничих задач.		+		+
3. Знаходити та аналізувати наукову та науково-технічну інформацію в галузі прикладної фізики та наноматеріалів із вітчизняних та зарубіжних джерел, в тому числі з використанням сучасних пошукових систем.		+	+	+
4. Виконувати аналіз спеціальної літератури,				

<p>формулювати постановку наукової або науково-технічної задачі, обирати методи та методики, складати програми наукових досліджень та науково-технічних розробок у галузі прикладної фізики та наноматеріалів.</p> <p>5. Обговорювати та знаходити прогресивні та інноваційні рішення проблем і завдань при виконанні науково-технічних та виробничих проектів.</p> <p>6. Встановлювати та аргументувати нові залежності між параметрами та характеристиками фізичних систем.</p> <p>7. Ефективно працювати як індивідуально, так і в складі команди, оцінювати та забезпечувати якість виконуваних робіт у галузі прикладної фізики та наноматеріалів.</p> <p>8. Коректно формулювати професійні висновки, апробувати їх та доносити до аудиторії різного фахового рівня, використовуючи сучасні методики наукової та технічної комунікації українською та іноземними мовами.</p> <p>9. Визначати напрямки перспективних досліджень з урахуванням світових тенденцій розвитку науки, техніки й технологій.</p> <p>10. Складати описи виконаних досліджень і проектів, що розробляються, обробки, аналізу та інтерпретації результатів досліджень, підготовки даних для складання звітів і презентацій, написання доповідей, статей та іншої науково-технічної документації.</p>			+	+
			+	+
	+			
			+	+
			+	+
	+		+	+
			+	+

7. Схема формування оцінки.

7.1 Форми оцінювання:

- семестрове оцінювання:

1. Модульна контрольна робота 1 – РН 1.– 20 балів/ 12 балів
2. Модульна контрольна робота 2 – РН 1.– 20 балів/ 12 балів
3. Практичні та семінари – РН 2., 3.– 12 балів/ 7 балів
4. Проміжне тестування РН 4. – 8 балів/ 5 балів

- підсумкове оцінювання: у формі іспиту

Формою проведення іспиту є тестова контрольна робота та співбесіда на основі неї. Результатами навчання, які оцінюються в тестовій контрольній роботі, є РН 1. Максимальна кількість балів, які можуть бути отримані студентом, становить 40 балів.

- умови допуску до підсумкового іспиту:

Студент допускається до іспиту за умови виконання всіх передбачених планом практичних робіт. Студент не допускається до іспиту, якщо під час семестру набрав менше, ніж 20 балів

7.2 Організація оцінювання:

Модульні контрольні роботи проводяться після завершення лекцій з відповідних розділів. Проміжне тестування проводиться упродовж лекційного курсу. Оцінювання роботи студента з рішення задач проводиться на семінарських заняттях у формі контрольної роботи.

7.3 Шкала відповідності оцінок

Відмінно / Excellent	90-100
Добре / Good	75-89
Задовільно / Satisfactory	60-74
Незадовільно / Fail	0-59

8. Структура навчальної дисципліни.

Тематичний план лекцій та лабораторних занять

№ п/п	Номер і назва теми*	Кількість годин		
		лекції	практичні заняття	Самостійна робота
<i>Розділ 1</i>				
1	<i>Тема 1. Вступ до курсу «Молекулярний дизайн». (Визначення термінів «Молекулярний дизайн», «Планування синтезу», «Структурно-орієнтований дизайн», «Функціонально-орієнтований дизайн». Дизайн та планування синтезів за допомогою комп'ютерних програм. Програма "Chematica". Приклади молекулярного дизайну. Виконання синтезів, синтетичні методи. Приклади ефективних синтетичних методів.)</i>	2		
2	<i>Самостійна робота. Синтез безперечно (умовно) корисних для діяльності людини сполук.</i>			8

3	<p>Тема 2. Принципи планування та виконання хімічних синтезів (частина перша). (Ранні приклади складних синтезів. Сучасні приклади складних синтезів. Ретросинтетичний аналіз. Визначення термінів «ретрон», «синтон», «синтетичний еквівалент», «ретросинтетичний розрив зв'язку», «стратегічний зв'язок». Основна література з хімічних реакцій. Електронні бази даних з хімічних реакцій. Приклади ретросинтетичних аналізів. Захист функціональних груп. Ортогональні захисні групи. Захист аміно-, карбоксильної, гідроксильної, карбонільної груп. Принципи застосування захисту у синтезах. Лінійний та конвергентний синтез.)</p>	2		
4	<p>Практичне заняття 1. Задачі органічного синтезу.</p>		4	
	<p>Самостійна робота. Тотальний синтез – приклад з літератури.</p>			8
	<p>Тема 3. Принципи планування та виконання хімічних синтезів (частина друга). (Критерії вибору стратегічного зв'язку. Електронні бази даних як допоміжний інструмент планування синтезів – приклади.)</p>	2		
	<p>Самостійна робота. База даних Reaxys.</p>			4
	<p>Тема 4. Стратегії планування синтезів. (Планування синтезів, виходячи з цільових сполук. Планування синтезів, орієнтоване на вихідні сполуки. Приклади.)</p>	2		
	<p>Самостійна робота. Знаходження в літературі публікацій, де описано планування синтезів, виходячи з цільових сполук (Journal of Organic Chemistry).</p>			
	<p>Тема 5. Принципи ретросинтетичного аналізу на прикладі (з літератури).</p>	2		
	<p>Практичне заняття 2. Розв'язування задач з планування органічних синтезів.</p>		2	
	<p>Самостійна робота. Розв'язування задач з планування органічних синтезів.</p>			8
Розділ 2				
	<p>Тема 6. Структурно-орієнтований дизайн - приклади. (Дизайн і синтез сполук, молекулярні остови яких утворюють правильні многогранники. Дизайн та синтез сполук з тетракоординованими атомами вуглецю, конфігурація яких суттєво відрізняється від тетраедричної. Дизайн та синтез сполук, що містять «планарний» атом карбону, «інвертований» атом карбону. «Молекулярні конструктори» та сполуки, форма яких нагадує макроскопічні об'єкти.)</p>	2		

Самостійна робота. <i>Органічні сполуки з екстремальними значеннями валентних зв'язків та кутів при атомах вуглецю.</i>			10
Тема 7. Дизайн, синтез та дослідження модельних сполук. (Визначення терміну «Модельна сполука». Типи модельних сполук. Моделі ензимів, приклади. Моделі транспортних протеїнів, приклади. Моделі для перевірки теоретичних концепцій та гіпотез, приклади. Моделі біохімічних процесів, модельні сполуки для тестування синтетичних планів і стратегій, приклади.)	2		
Практичне заняття 3. <i>Дизайн моделей ензимів – практичні задачі.</i>		2	
Самостійна робота. <i>Іменні реакції в органічній хімії.</i>			6
Тема 8. Дизайн наноматеріалів (приклад). (ДФулерени та нанотрубки. Дизайн та синтез наноалмазів. Діамондоїди. Дизайн наноматеріалів для медицини. Кванові точки, дизайн та синтез, Нанопористий кремній.)	2		
Самостійна робота. <i>Підготовка та презентація доповіді з теми, запропонованої викладачем, що присвячена молекулярному дизайну (на вибір).</i>			8
Тема 9. Функціонально-орієнтований дизайн – хіральні ліганди для металокомплексних катализаторів. (Гомогенний катализ реакції гідрування. Механізм металокомплексного каталізу реакції гідрування. Хіральні ліганди для металокомплексних катализаторів. Використання хіральних катализаторів в асиметричному гідруванні. Принципи дизайну хіральних лігандів для металокомплексних катализаторів гідрування. Ліганди DIPAMP, BINAP, DuPhos. Монодентатні хіральні фосфолани та їх комплекси, що використовуються для асиметричного гідрування)	2		
Практичне заняття 4. <i>Планування органічного синтезу за допомогою бази даних Reaxys на прикладі.</i>		2	
Самостійна робота. <i>Підготовка та презентація доповіді з теми, запропонованої викладачем, що присвячена молекулярному дизайну (на вибір).</i>			4
Тема 10. Дизайн молекул з незвичайною топологією. (Дизайн і синтез ротаксанів, катенанів. Ідеї використання ротаксанів та катенанів. Молекулярна електроніка. Молекулярні стрічки Мебіуса, молекулярні вузли. Дендримери, їх дизайн, синтез та використання).	2		

	<p>Самостійна робота. Підготовка та презентація доповіді з теми, запропонованої викладачем, що присвячена молекулярному дизайну (на вибір).</p>			<p>4</p>
--	--	--	--	-----------------

Загальний обсяг **90 год.**, в тому числі:

Лекції – **20 год**

Практичні – **10 год.**

Самостійна робота – **60 год.**

9. Рекомендовані літературні джерела:

Основна:

- [1] А. Ф. Бочков, В. А. Смит, Р. Кейпл. Органический синтез – наука или искусство? М., 2007.
- [2] В.А.Смит, Н.Д.Дильман. Основы органического синтеза. М., 2009.
- [3] Р. Маки, Д. Смит. Путеводитель по органическому синтезу. М., 1985.
- [4] А.Ф.Бочков, В.А.Смит. Органический синтез. М., 1987.
- [5] Т.В.Мандельштам. Стратегия и тактика органического синтеза. Л., 1989.
- [6] Дж. Марч. Органическая химия. Реакции, механизмы и структура. Углубленный курс для университетов и химических вузов. В 4-х т. , М., 1987.

Додаткова:

- [7] W.A.Smith., A.F.Bochkov, R. Caple. Organic Synthesis – the Science behind the Art. Cambridge, 1998.
- [8] M.B.Smith. Organic Synthesis. N.-Y., 1994.