

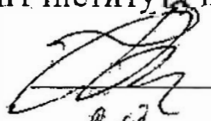
КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ ІМЕНІ ТАРАСА
ШЕВЧЕНКА

Інститут високих технологій
Кафедра супрамолекулярної хімії

«ЗАТВЕРДЖУЮ»

Директор

НН Інституту високих технологій


I.V. Комаров

«29» 09 2021 року

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Дизайн та синтез хімічних сполук з наперед заданими властивостями

для здобувачів наукового ступеня доктор філософії

галузь знань	10 Природничі науки
спеціальність	102 Хімія
рівень вищої освіти	третій освітньо-науковий
освітньо-наукова програма	"Молекулярний дизайн та синтез"
вид дисципліни	обов'язкова

Форма навчання - очна (денна), заочна

Навчальний рік - 2021/2022

Курс - 2, півріччя - 2

Кількість кредитів ECTS - 4

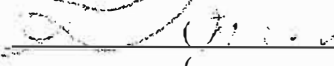
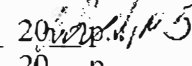
Мова викладання, навчання

та оцінювання - українська

Форма заключного контролю - іспит

Викладач:

Комаров Ігор Володимирович, директор НН Інституту високих технологій.

Пролонговано: на 20__/20__ н.р.  «__» __ 20__ р. 
на 20__/20__ н.р. _____ («__») «__» _____ 20__ р.

КИЇВ – 2021

Розробник:

Комаров Ігор Володимирович, директор Інституту високих технологій.

«ПОГОДЖЕНО»



в.о. завідувача
кафедри супрамолекулярної
хімії
д.х.н., проф. Д.М. Волочнюк

Протокол № 04 від 23 вересня
2021 р.

Схвалено науково-методичною комісією Навчально-наукового
Інституту високих технологій

Протокол № 01 від 29 вересня 2021 р.

Голова науково-методичної комісії



Н.М. Русінчук

29 вересня 2021 року.

1. Мета дисципліни – ознайомити аспірантів з основними напрямками хімії, де дизайн сполук є основною частиною досліджень чи розробки технологій.

2. Попередні вимоги до опанування або вибору навчальної дисципліни:

Навчальна дисципліна “Дизайн та синтез хімічних сполук з наперед заданими властивостями” є частиною вибіркового блоку дисциплін та базується на циклі дисциплін професійної та практичної підготовки магістра, а саме: “Органічна хімія”, “Фізичні методи дослідження хімічних сполук”, “Нанохімія”, “Механізми органічних реакцій”.

Попередні вимоги:

- *аспірант повинен знати:*

науково-теоретичний та практичний матеріал навчальних дисциплін, які викладаються студентам освітнього рівня «Бакалавр» та «Магістр».

- *аспірант повинен вміти:*

планувати синтези органічних сполук, працювати з науково-методичною літературою.

3. Анотація навчальної дисципліни. В курсі формулюються основні концепції та стратегії дизайну хімічних сполук та на яскравих прикладах демонструється застосування цих концепцій та стратегій у конкретних сучасних наукових дослідженнях.

4. Завдання (навчальні цілі):

Навчання дисципліні має на меті розвинути у студентів такі компетентності:

ІК. Спроможність розв’язувати комплексні проблеми хімії в секторі дизайну та синтезу, що передбачає набуття глибоких знань та професійної практики.

ЗК-1. Здатність до абстрактного мислення, аналізу синтезу;

ЗК-4. Здатність до пошуку, оброблення на аналізі інформації з різних джерел;

ЗК-5. Здатність генерувати нові ідеї (креативність);

ЗК-8. Здатність застосовувати знання у практичних ситуаціях;

ЗК-9. Здатність до роботи в команді, вміння мотивувати інших у просуванні до спільної мети;

ЗК-10. Здатність комунікації на фахову тематику з фахівцями інших галузей;

ЗК-11. Навички презентації наукових матеріалів та аргументів у письмовій та усній формі перед цільовою аудиторією.

(ФК-1). Здатність формулювати наукову проблему, робочі гіпотези досліджуваної проблеми, що передбачає глибоке переосмислення наявних та створення нових цілісних знань та/або професійної практики.

(ФК-2). Здатність до критичного аналізу і оцінки сучасних наукових досягнень, генерування нових ідей при вирішенні дослідницьких і практичних задач.

(ФК-3). Здатність застосовувати знання та уміння при розв’язанні кількісних та якісних хімічних задач незнайомого типу.

(ФК-4). Здатність демонструвати знання та розуміння важливих фактів, концепцій, принципів та теорій з хімії.

(ФК-6). Здатність до фахового спілкування та написання фахових текстів англійською мовою

(ФК-7). Здатність планувати, проектувати та виконувати наукові дослідження/проекти зі стадії остановки задачі до оцінювання і розгляду результатів та отриманих даних, що включає вміння вибрати потрібну техніку та процедури.

(ФК-8). Здатність до опанування нових областей хімії шляхом самостійного навчання

(ФК-9). Здатність ефективно брати участь в міждисциплінарних командах, що працюють над проектами з хімії.

(ФК-11). Розуміння етичних та соціальних проблем, які стоять перед хімією, розуміння етичних стандартів досліджень і професійної діяльності в галузі хімії (наукова доброчесність).

(ФК-14). Навчальні навички, необхідні для подальшого професійного розвитку.

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 (за необхідності)	Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни
Код	Результат навчання			
1	аспірант повинен знати:	лекційні заняття, заняття з використанням хімічних пакетів	письмові модульні контрольні роботи, оцінювання виконання завдань для самостійної роботи	до 45
1.1	принципи планування синтезів	лекція	письмові модульні контрольні роботи, оцінювання виконання завдань для самостійної роботи	
1.2	стратегії дизайну сполук з наперед заданими властивостями	лекція	==/=	
2	аспірант повинен вміти:	лекційні заняття, заняття з використанням хімічних пакетів	письмові модульні контрольні роботи, оцінювання виконання завдань для самостійної роботи	до 45
2.1	Формулювати принципи молекулярного дизайну, виходячи з конкретних завдань дослідження	==/=	==/=	
2.2	Орієнтуватися в сучасній фаховій літературі, у тому числі - патентній	==/=	==/=	
3	комунікація	лекційні заняття, заняття з використанням хімічних пакетів		до 5
3.1	здатність грамотно будувати комунікацію, виходячи з мети і ситуації спілкування			
3.2	здатність бути відповідальним за внесок в роботу команди при вирішенні проблеми	лекційні заняття з використанням роботи у підгрупах	оцінювання виконання завдань для самостійної	
4	автономність та відповідальність	лекційні заняття, заняття з використанням хімічних пакетів	письмові модульні контрольні роботи, оцінювання виконання завдань для самостійної роботи	до 5
4.1	самостійність у навчанні та/або професійній діяльності			

6. Співвідношення результатів навчання дисципліни із програмними результатами навчання

Результати навчання дисципліни	1.1	1.2	2.1	2.2	3.1	3.2	4.1
Програмні результати навчання							
1. Знання							
1.1 Володіти сучасними передовими концептуальними та методологічними знаннями в галузі хімії та суміжних галузей знань;	+	+	+	+	+	+	+
1.2. Знати праці провідних зарубіжних вчених, наукових шкіл та фундаментальних праць у галузі дослідження; як сформулювати мету власного наукового дослідження в контексті світового наукового прогресу;	+	+	+	+	+		
1.3. Знати принципи фінансування науково-дослідної роботи та структуру кошторисів на її виконання, вміти підготувати запит на отримання фінансування,					+		

<p>вміти підготувати звітну документацію;</p> <p>1.4. Критичний аналіз, оцінка і синтез нових ідей.</p> <p>2. Уміння</p> <p>2.1 З нових дослідницьких позицій формулювати загальну методологічну базу власного наукового дослідження, усвідомлювати його актуальність, мету і значення для розвитку інших галузей науки, суспільно-політичного, економічного життя;</p> <p>2.2 Ініціювати, організувати та проводити комплексні дослідження в галузі науково-дослідницької та інноваційної діяльності, результатом яких є отримання нових знань;</p> <p>2.3 Формувати команду дослідників для вирішення локальної задачі (формулювання дослідницької проблеми, робочих гіпотез, збору інформації, підготовки пропозицій);</p> <p>2.4 Формулювати наукову проблему з огляду на сучасні наукові тенденції;</p> <p>2.5 Формулювати робочі гіпотези та моделі досліджуваної проблеми;</p> <p>2.6. Аналізувати наукові праці в галузі хімії та суміжних наук, виявляючи дискусійні та мало досліджені питання;</p> <p>2.7 Моніторинг наукових джерел інформації щодо досліджуваної проблеми;</p> <p>2.8 Здійснювати процедуру встановлення інформаційної цінності джерел шляхом порівняльного аналізу з іншими джерелами;</p> <p>2.9 Визначати принципи та методи дослідження, використовуючи міждисциплінарні підходи.</p> <p>3. Комунікація</p> <p>3.1. Спілкуватися в діалоговому режимі з широкою науковою спільнотою та громадськістю в галузі хімії;</p> <p>3.2. Кваліфіковано відображати результати наукових досліджень у наукових статтях, вести конструктивний діалог з рецензентами та редакторами;</p> <p>3.3. Професійно презентувати результати своїх досліджень на міжнародних наукових конференціях, семінарах, практично використовувати іноземну мову (в першу чергу - англійську) у науковій, інноваційній та педагогічній діяльності;</p> <p>3.4. Працювати в команді, мати навички міжособистісної взаємодії;</p> <p>3.5. Використовувати сучасні інформаційні та комунікативні технології при спілкуванні, обміні інформацією, зборі, аналізі, обробці, інтерпретації тощо.</p> <p>4. Автономія та відповідальність</p> <p>4.1. Ініціювати наукові та інноваційні комплексні проекти в галузі хімії, бути лідером та автономним під час їх реалізації;</p> <p>4.2. Діяти соціально відповідально та громадянсько свідомо, дотримуватися професійної та корпоративної етики;</p> <p>4.3. Саморозвиватися і самовдосконалюватися, нести відповідальність за новизну наукових досліджень та прийняття експертних рішень;</p> <p>4.4. Приймати обґрунтовані рішення, мотивувати людей.</p>	+		+		+		+
---	---	--	---	--	---	--	---

7. Схема формування оцінки

7.1. Форми оцінювання аспірантів: рівень досягнення всіх запланованих результатів навчання визначається за результатами написання письмових контрольних робіт і за результатами виконання самостійних завдань. Вклад результатів навчання у підсумкову оцінку, за умови їх опанування на належному рівні такий:

- результати навчання 1.1 – 1.3 [знання] до 45 %;
- результат навчання 2.1 – 2.3 [вміння] – до 45%;
- результат навчання 3.1 [комунікація] – до 5%;
- результат навчання 4.1 [автономність та відповідальність] – до 5%;

Форми оцінювання аспірантів:

- **семестрове оцінювання:** контроль здійснюється за таким принципом. Навчальний семестр має один змістовний модуль. Після завершення теми №6 проводиться письмова модульна контрольна робота. Обов'язковим для допуску до іспиту є: написання модульної контрольної роботи з кількістю балів не менше 12 та виступу з доповіддю на семінарі.
- **підсумкове оцінювання (у формі іспиту):** форма іспиту – письмово-усна. Екзаменаційний білет складається із 2 питань, питання оцінюються по 20 балів. Всього за іспиті можна отримати від 0 до 40 балів. Умовою досягнення позитивної оцінки за дисципліну є отримання не менш ніж 60 балів, оцінка за іспит не може бути меншою **24 балів**.
- **умови допуску до підсумкового іспиту:** умовою допуску до іспиту є отримання аспірантом сумарно не менше, ніж *критично-розрахунковий мінімум 36 балів* за семестр. Аспіранти, які протягом семестру сумарно набрали меншу кількість балів, ніж критично-розрахунковий мінімум **36 балів**, для одержання допуску до іспиту обов'язково повинні написати додаткову контрольну роботу.

У випадку відсутності аспіранта з поважних причин відпрацювання та перездачі модульних контрольних робіт здійснюються у відповідності до „Положення про організацію освітнього процесу у Київському національному університеті”

7.2. Організація оцінювання;

Оцінювання за формами контролю:

	<i>Min. – балів</i>	<i>ЗМ</i>	<i>Max. – балів</i>
Модульна контрольна робота	12		20
Виступ на семінарі	15		25
Виконання аспірантами самостійних робіт	9		15

Орієнтований графік оцінювання:

	<i>Орієнтовний період для здійснення відповідної форми оцінювання</i>
Модульна контрольна робота 1	травень
Виступ на семінарі	травень
Виконання аспірантами самостійних робіт	березень - червень
Добір балів/додаткова контрольна робота та/або доскладання домашніх завдань	червень
Іспит	червень

Розрахунок балів, які аспірант отримує при успішній здачі іспиту:

	Змістовий модуль	Іспит	Підсумкова оцінка
<i>Мінімум</i>	36	24	60
Максимум	60	40	100

7.3. Шкала відповідності оцінок

Оцінка (за національною шкалою) / National grade	Рівень досягнень, % / Marks, %
Відмінно / Excellent	90-100%
Добре / Good	75-89%
Задовільно / Satisfactory	60-74%
Незадовільно / Fail	0-59%

8. Структура навчальної дисципліни. Тематичний план лекційних занять

№ з/п	Назва теми	У тому числі		
		Лекції	Практичні заняття	Самостійна робота
1	Структурно-орієнтований і функціонально-орієнтований молекулярний дизайн	2		8
2	Структурно-орієнтований дизайн лікарських засобів – на сучасному прикладі з літератури	2		11
3	Лігандно-орієнтований дизайн лікарських засобів – сучасний приклад з літератури	2	2	11
4	Дизайн та синтез модельних сполук – історичні та сучасні приклади	2		11
5	Дизайн лігандів для каталізаторів асиметричних хімічних перетворень і їх синтез – сучасний приклад з літератури	2		11
6	Дизайн органокаталізаторів, способи їх отримання – приклад з досвіду наукової роботи лектора	2		11
7	Дизайн сучасних матеріалів з наперед заданими властивостями – доповідь по розданих матеріалах	2		11
8	Дизайн флуоресцентних міток для дослідження біооб'єктів – дизайн та синтез з досвіду наукової роботи лектора	2		11
9	ЯМР-мітки- дизайн, синтез	2	2	11
ЗАГАЛОМ		18	4	96

Загальний обсяг **120** год., в тому числі: Лекцій – **18**- год.

Практичні заняття – **4** год. Консультації – **2** год.

Самостійна робота - **96** год.

9. Рекомендовані джерела:

Основні:

[1] Philip Ball. Designing the molecular world – chemistry at the frontier. Princeton University press, NJ, 2020. <https://www.perlego.com/book/1725441/designing-the-molecular-world-chemistry-at-the-frontier-pdf>

Додаткові:

[2] Сучасна фахова література (статті в журналах, огляди), що надається викладачем індивідуально в процесі проходження курсу здобувачами. Список оновлюється щорічно.

Список на 2022/2023 навчальний рік:

- MacMillan, D. W. (2008). The advent and development of organocatalysis. Nature, 455(7211), 304-308.

- NAGUIB, Michael, et al. Two-dimensional nanocrystals produced by exfoliation of Ti₃AlC₂. Advanced materials, 2011, 23.37: 4248-4253.

- IBÁÑEZ, Susana; VICENT, Cristian; PERIS, Eduardo. Clippane: a mechanically interlocked molecule (MIM) based on molecular tweezers. *Angewandte Chemie International Edition*, 2022, 61.2: e202112513.
- ZHONG, Yong-Li, et al. Scalable Asymmetric Synthesis of MK-8998, a T-Type Calcium Channel Antagonist. *The Journal of Organic Chemistry*, 2021, 87.4: 2120-2128.
- FETZER, Florian, et al. Au₂₀ (tBu₃P)₈: A Highly Symmetric Metalloid Gold Cluster in Oxidation State 0. *Angewandte Chemie International Edition*, 2022, 61.36: e202206019.
- PATRICK, Connor W., et al. Polyynes [3] rotaxanes: Synthesis via dicobalt carbonyl complexes and enhanced stability. *Angewandte Chemie*, 2022, 134.10: e202116897.
- PATHAK, Dibyajyoti; SRIVASTAVA, Aasheesh. Macrocyclic enforcement of twist in a secondary amide: reactivity and influence on photoisomerisation. *Chemical Communications*, 2022, 58.91: 12653-12656.
- KRZESZEWSKI, Maciej; ITO, Hideto; ITAMI, Kenichiro. Infinitene: A helically twisted figure-eight [12] circulene topoisomer. *Journal of the American Chemical Society*, 2021, 144.2: 862-871.
- BORSLEY, Stefan, et al. Tuning the force, speed, and efficiency of an autonomous chemically fueled information ratchet. *Journal of the American Chemical Society*, 2022, 144.37: 17241-17248.
- EPPLIN, Rachel C., et al. [2]-Ladderanes as isosteres for meta-substituted aromatic rings and rigidified cyclohexanes. *Nature Communications*, 2022, 13.1: 6056.
- PUMM, Anna-Katharina, et al. A DNA origami rotary ratchet motor. *Nature*, 2022, 607.7919: 492-498.
- NAKAKUKI, Yusuke; HIROSE, Takashi; MATSUDA, Kenji. Logical Design of Small HOMO–LUMO Gap: Tetrabenzo [f, jk, mn, r][7] helicene as a Small-Molecule Near-Infrared Emitter. *Organic Letters*, 2022, 24.2: 648-652.