

КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

Навчально науковий інститут високих технологій

Кафедра супрамолекулярної хімії



«ЗАТВЕРДЖУЮ»

Заступник директора
з науково – педагогічної роботи
Галина ГРАБЧУК

«24» травня 2022 року

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

МОЛЕКУЛЯРНИЙ ДИЗАЙН

(повна назва навчальної дисципліни)

для студентів

галузь знань	10 Природничі науки
спеціальність	102 Хімія
освітній рівень	магістр
освітня програма	Високі технології (Хімія та наноматеріали)
вид дисципліни	<u>вибіркова</u>

Форма навчання	денна
Навчальний рік	<u>2022/2023</u>
Семестр	третій
Кількість кредитів ECTS	3
Мова викладання, навчання та оцінювання	українська
Форма заключного контролю	іспит

Викладач: 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)

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 _____

 - Русінук Н.М.
_____ (підпис) _____ (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:

- ЗК1. Знання та розуміння предметної області та розуміння професійної діяльності
- ЗК2. Здатність вчитися та оволодівати сучасними знаннями.
- ЗК3. Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу.
- ЗК4. Здатність застосовувати знання у практичних ситуаціях.
- ЗК5. Здатність до адаптації та дії в новій ситуації.
- ЗК6. Здатність генерувати нові ідеї (креативність), а також формулювати судження, маючи неповну або обмежену інформацію.
- ЗК7. Навички використання інформаційних і комунікаційних технологій в хімічних дослідженнях та професійній діяльності.
- ЗК8. Здатність оцінювати та забезпечувати якість виконуваних робіт.
- ЗК9. Здатність спілкуватися з представниками інших професійних груп різного рівня (з експертами з інших галузей знань/видів економічної діяльності).
- ЗК10. Здатність спілкуватися англійською та (за можливості) іншою іноземною мовою, як усно, так і письмово.
- ЗК11. Здатність нести етичну відповідальність за дії, пов'язані із застосуванням власних знань та суджень.
- ЗК12. Здатність працювати автономно, брати участь у командній роботі, здійснювати проектну діяльність під керівництвом.

- ЗК14. Здатність до пошуку, критичного аналізу та обробки інформації з різних джерел
- ФК1. Здатність використовувати закони, теорії та концепції хімії у поєднанні із відповідними математичними інструментами для опису природних явищ.
- ФК2. Здатність будувати адекватні моделі хімічних явищ, досліджувати їх для отримання нових висновків та поглиблення розуміння природи, в тому числі з використанням методів молекулярного, математичного і комп'ютерного моделювання.
- ФК3. Здатність організовувати, планувати та реалізовувати хімічний експеримент.
- ФК4. Здатність інтерпретувати, об'єктивно оцінювати і презентувати результати свого дослідження.
- ФК5. Здатність застосовувати методи комп'ютерного моделювання для вирішення наукових, хіміко-технологічних проблем та проблем хімічного матеріалознавства.
- ФК6. Здатність здобувати нові знання в галузі хімії та інтегрувати їх із уже наявними.
- ФК7. Здатність дотримуватися етичних стандартів досліджень і професійної діяльності в галузі хімії (академічна доброчесність, ризики для людей і довкілля тощо).
- ФК8. Здатність формулювати нові гіпотези та наукові задачі в галузі хімії, вибрати напрями та відповідні методи для їх розв'язання на основі розуміння сучасної проблематики досліджень в галузі хімії та беручи до уваги наявні ресурси.
- ФК9. Здатність обирати оптимальні методи та методики дослідження.
- ФК10. Володіння загальною методологією здійснення наукового дослідження.
- ФК11. Здатність формулювати нові гіпотези та наукові задачі в галузі хімії, вибрати належні напрями та відповідні методи для їх розв'язання, беручи до уваги наявні ресурси.
- ФК12. Розуміння етичних стандартів досліджень і професійної діяльності в галузі хімії (наукова доброчесність).

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%

		<i>Практичні заняття</i>	<i>Контрольні роботи</i>	15%
3.	<i>3.1. Вміти працювати в групі на семінарах та практичних роботах</i>	<i>Практичні заняття</i>	<i>Звіти</i>	10%
4.	<i>4.1. Вміти самостійно працювати з науковою та навчально-методичною літературою, здійснювати пошук та узагальнення науково-технічної інформації, робити презентації, використовуючи прочитаний матеріал.</i>	<i>Самостійна робота</i>	<i>Контрольна робота</i>	10%

6. Співвідношення результатів навчання дисципліни із програмними результатами навчання

Результати навчання дисципліни	Програмні результати навчання	1	2	3	4
P1. Знати та розуміти наукові концепції та сучасні теорії хімії, а також фундаментальні основи суміжних наук.		+	+	+	+
P2. Глибоко розуміти основні факти, концепції, принципи і теорії, що стосуються предметної області, опанованої у ході магістерської програми, використовувати їх для розв'язання складних задач і проблем, а також проведення досліджень з відповідного напрямку хімії.		+	+	+	+
P3. Застосовувати отримані знання і розуміння для вирішення нових якісних та кількісних задач хімії.		+	+		+
P4. Синтезувати хімічні сполуки із заданими властивостями, аналізувати їх і оцінювати відповідність заданим вимогам.		+	+		+
P5. Володіти методами комп'ютерного моделювання структури, параметрів і динаміки хімічних систем.			+	+	+
P6. Знати методологію та організації наукового дослідження.					
P7. Вільно спілкуватися англійською та (за можливості) іншою іноземною мовою з професійних питань, усно і письмово презентувати результати досліджень з хімії іноземною мовою, брати участь в обговоренні проблем хімії.				+	
P8. Вміти ясно і однозначно донести результати власного дослідження до фахової аудиторії та/або нефакхівців.				+	
P9. Збирати, оцінювати та аналізувати дані, необхідні для розв'язання складних задач хімії, використовуючи відповідні методи та інструменти роботи з даними.		+	+	+	+
P10. Планувати, організувати та здійснювати експериментальні дослідження з хімії з використанням сучасного обладнання, грамотно обробляти їх результати та робити обґрунтовані висновки.			+	+	+
P11. Складати технічне завдання до проекту, розподіляти час, організувати свою роботу і роботу колективу, складати звіт.		+	+	+	+
P12. Оцінювати ризики у професійній діяльності та здійснювати запобіжні дії.				+	+

P13. Аналізувати наукові проблеми та пропонувати їх вирішення на абстрактному рівні шляхом декомпозиції їх на складові, які можна дослідити окремо.	+	+	+	+
P14. Інтерпретувати експериментально отримані дані та співвідносити їх з відповідними теоріями в хімії.	+	+	+	+
P15. Володіння загальною методологією здійснення наукового дослідження.	+	+		
P16. Використовувати інформаційно-комунікаційні технології для вирішення загальних професійних задач.	+	+	+	+
P17. Працювати з хімічними та біологічними базами даних.	+	+		
P18. Проводити молекулярний дизайн каталізаторів, фотопровідних полімерних композитів та колоїдних розчинів наноматеріалів.	+	+		
P19. Проводити швидкий синтез та комп'ютерну генерацію різних структурно споріднених біологічно активних сполук чи матеріалів для високопродуктивного біологічного скринінгу одержаних речовин.	+	+		+
P20. Знати основні принципи виведення на ринок нового фармацевтичного препарату.	+	+	+	+
P21. Знати основні принципи роботи напівпровідникових хімічних сенсорів на основі наноматеріалів та розуміти алгоритми їх створення	+	+	+	+

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 недопускається 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
Розділ 1				
1	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.)	2		
2	Самостійна робота. Синтез безперечно (умовно) корисних для діяльності людини сполук.			8
3	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.)	2		
4	Практичне заняття 1. Задачі органічного синтезу.		4	
	Самостійна робота. Тотальний синтез – приклад з літератури.			8
	Тема 3. Принципи планування та виконання хімічних синтезів (частина друга). (Критерії вибору стратегічного зв'язку. Електронні бази даних як допоміжний інструмент планування синтезів – приклади.)	2		
	Самостійна робота. База даних Reaxys.			4
	Тема 4. Стратегії планування синтезів. (Планування синтезів, виходячи з цільових сполук. Планування синтезів, орієнтоване на вихідні сполуки. Приклади.)	2		
	Самостійна робота. Знаходження в літературі публікацій, де описано планування синтезів, виходячи з цільових сполук (<i>Journal of Organic Chemistry</i>).			
	Тема 5. Принципи ретросинтетичного аналізу на прикладі (з літератури).	2		
	Практичне заняття 2. Розв'язування задач з планування органічних синтезів.		2	

Самостійна робота. Розв'язування задач з планування органічних синтезів.			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 каталізаторів. (Гомогенний каталіз реакції гідрування. Механізм металокомплексного каталізу реакції гідрування. Хіральні ліганди для металокомплексних каталізаторів. Використання хіральних каталізаторів в асиметричному гідруванні. Принципи дизайну хіральних лігандів для металокомплексних каталізаторів 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.