

КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

Інститут високих технологій

кафедра супрамолекулярної хімії

«ЗАТВЕРДЖУЮ»
Заступник директора
з навчальної роботи
Грабчук Г.М.
« » 2022 року



РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Молекулярне моделювання
(повна назва навчальної дисципліни)

галузь знань 10 Природничі науки

спеціальність 102 Хімія

освітній рівень магістр

освітня програма Високі технології (хемоінформатика)

вид дисципліни вибіркова

Форма навчання денна

Навчальний рік 2022/2023

Семестр тетій

Кількість кредитів ECTS 4

Мова викладання, навчання
та оцінювання українська

Форма заключного контролю залік

Викладач: д.х.н., проф. Комаров І.В

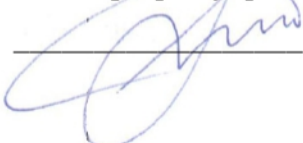
Пролонговано: на 20__/20__ н.р. _____ (_____) « » 20__ р.
(підпис, ПІБ, дата)

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

КИЇВ – 2022

Розробник: д.х.н., проф. Комаров І.В.

ЗАТВЕРДЖЕНО:
Зав. кафедри супрамолекулярної хімії


_____ (Рябухін С.В.)

Протокол №7 від «19» серпня 2022 року

Схвалено науково - методичною комісією Інституту високих технологій

Протокол №1 від «9» вересня 2022 року

Голова науково-методичної комісії _____  (Русінчук Н. М.)

ВСТУП

1. Мета дисципліни :

Ознайомлення студентів з принципами молекулярного дизайну та моделювання як одного з центральних інструментів наукового пізнання та наступного синтезу сполук, оволодіння студентами навичками самостійного дизайну 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 «молекулярне моделювання» присвячений не моделюванню структур хімічних сполук, з допомогою механічних моделей чи на комп'ютері, а модельним дослідженням у загальному сенсі, з використанням модельних сполук як сурогатів об'єктів досліджень. На яскравих прикладах, використовуючи останні досягнення науки продемонстровано як можна сконструювати сполуки, що дозволяють отримати знання про об'єкти досліджень, корисні для медичної хімії, матеріалознавства, енергоємних технологій.

4. Завдання (навчальні цілі)

Даний курс покликаний сформуванню у студентів такі компетенції:

ЗК 2. Здатність вчитися і оволодівати сучасними знаннями.

ЗК 3. Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу.

ЗК 4. Здатність застосовувати знання у практичних ситуаціях.

ЗК 5. Здатність до адаптації та дії в новій ситуації.

ЗК 6. Здатність генерувати нові ідеї (креативність).

ЗК 7. Здатність використовувати інформаційні та комунікаційні технології.

ЗК 8. Здатність оцінювати та забезпечувати якість виконуваних робіт.

ЗК 9. Здатність спілкуватися з представниками інших професійних груп різного рівня (з експертами з інших галузей знань/видів економічної діяльності).

ЗК 12. Здатність працювати автономно.

ЗК 14. Здатність до пошуку, критичного аналізу та обробки інформації з різних джерел.

ФК 1. Здатність використовувати закони, теорії та концепції хімії у поєднанні із відповідними математичними інструментами для опису природних явищ.

ФК 2. 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.

ФК 4. Здатність інтерпретувати, об'єктивно оцінювати і презентувати результати свого дослідження.

ФК 5. Здатність застосовувати методи комп'ютерного моделювання для вирішення наукових, хіміко-технологічних проблем та проблем хімічного матеріалознавства.

ФК 6. Здатність здобувати нові знання в галузі хімії та інтегрувати їх із уже наявними.

ФК 8. Здатність формулювати нові гіпотези та наукові задачі в галузі хімії, вибирати напрями та відповідні методи для їх розв'язання на основі розуміння сучасної проблематики досліджень в галузі хімії та беручи до уваги наявні ресурси.

ФК 9. Здатність обирати оптимальні методи та методики дослідження.

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 принципи методу моделювання, загальні і в застосуванні до хемоінформатичних проблем. 1.2 основні прийоми планування синтезів хімічних сполук	Лекції	Контрольні роботи	35%
2.	Вміти: 2.1 розв'язувати проблемні задачі з молекулярного дизайну вміти планувати синтези змодельованих сполук	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	1.2	2.1	3.1	4.1
Програмні результати навчання					
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.	+	+	+	+	
P5. Володіти методами комп'ютерного моделювання структури, параметрів і динаміки хімічних систем.	+	+	+		
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.		+	+	+	

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 заліку

Формою проведення заліку 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 заліку:

Студент допускається до заліку за умови виконання всіх передбачених планом практичних робіт. Студент не допускається до заліку, 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
Зараховано / Passed	60-100
Не зараховано / Fail	0-59

8. Структура навчальної дисципліни.

Тематичний план лекцій та лабораторних занять

Номер і назва теми*	Кількість годин		
	лекції	практичні заняття	самостійна робота
Розділ 1			
Тема 1. Вступ до курсу «Молекулярний дизайн». (Визначення термінів «Молекулярний дизайн», «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		
Самостійна робота. Синтез безперечно (умовно) корисних для діяльності людини сполук.			20
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	2		

застосування захисту у синтезах. Лінійний та конвергентний синтез.)			
Практичне заняття 1. Задачі органічного синтезу.		8	
Самостійна робота. Тотальний синтез – приклад з літератури.			20
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.			20
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 (Journal of Organic Chemistry).			
Тема 5. Принципи ретросинтетичного аналізу на прикладі (з літератури).	2		
Практичне заняття 2. Розв'язування задач з планування органічних синтезів.		4	
Самостійна робота. Розв'язування задач з планування органічних синтезів.			10
Розділ 2			
Тема 6. Дизайн, синтез та дослідження модельних сполук. Частина 1. (Визначення терміну «Модельна сполука». Типи модельних сполук. Дизайн і синтез сполук, що використовуються як моделі для дослідження теоретичних проблем хімії.)	2		
Тема 7. Дизайн, синтез та дослідження модельних сполук. Частина 2. (Моделі ензимів, приклади. Моделі транспортних протеїнів, приклади.)	2		
Практичне заняття 3. Дизайн моделей ензимів – практичні задачі.		4	
Тема 8. Дизайн, синтез та дослідження модельних сполук. Частина 3. (Моделі біохімічних процесів, модельні сполуки для тестування синтетичних планів і стратегій, приклади.)	2		
Самостійна робота. Підготовка та презентація доповіді з теми, запропонованої викладачем, що присвячена молекулярному дизайну (на вибір).			10
Тема 9. Дизайн, синтез та дослідження модельних сполук. Частина 4. (Моделі сполук для дослідження каталітичних процесів, підходів до «зеленої хімії» та екологічно чистих хімічних виробництв)	2		
Практичне заняття 4. Планування органічного синтезу за допомогою бази даних Reaxys на прикладі.		4	
Тема 10. Дизайн, синтез та дослідження модельних сполук. Частина 5. (Моделі дослідження в медичній хімії. Пошук лідів на основі модельних досліджень).	2		
Самостійна робота. Підготовка та презентація доповіді з теми, запропонованої викладачем, що присвячена молекулярному дизайну (на вибір).			4

Загальний обсяг 120 год., в тому числі:

Лекції – 20 год

Практичні – 20 год.

Самостійна робота – 80 год.

9. Рекомендовані літературні джерела:

Основна:

[1] Philip Ball. Designing the molecular world – chemistry at the frontier. Princeton University press, NJ, 1996.

Додаткова:

[2] W.A.Smith., A.F.Bochkov, R. Caple. Organic Synthesis – the Science behind the Art. Cambridge, 1998.

[3] M.B.Smith. Organic Synthesis. N.-Y., 1994.

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