

КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ ІМЕНІ ТАРАСА
ШЕВЧЕНКА

Інститут високих технологій
Кафедра супрамолекулярної хімії

«ЗАТВЕРДЖУЮ»

Директор

ІН Інституту високих технологій

І.В. Комаров

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	вибіркова

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 ІН Інституту високих технологій.

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

КИЇВ – 2021

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):

1. Узагальнити і систематизувати знання аспірантів у галузі планування синтезу органічних сполук та отримання матеріалів.

2. Навчити формулювати принципи дизайну молекул, виходячи з завдань конкретних досліджень.

3. Навчити орієнтуватися в сучасній літературі з дизайну і синтезу сполук з наперед заданими властивостями.

4. Прищепити вміння використовувати сучасні досягнення ІТ в молекулярному дизайні.

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	<i>лекція</i>	письмові модульні контрольні роботи, оцінювання виконання завдань для самостійної роботи	
1.2	стратегії дизайну сполук з наперед заданими властивостями	<i>лекція</i>	==/=	
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			

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 передачі модульних контрольних робіт здійснюються у відповідності до „Положення про організацію освітнього процесу у Київському національному університеті”

7.2. Організація оцінювання;

Оцінювання за формами контролю:

	ЗМ	
	<i>Min. – балів</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>	<i>36</i>	<i>24</i>	<i>60</i>
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 – основні принципи та інструменти	2		11
3	Лігандно-орієнтований дизайн лікарських засобів – основні принципи та інструменти	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	2		11
6	Дизайн органокаталізаторів, способи їх отримання	2		11
7	Дизайн сучасних матеріалів з наперед заданими властивостями	2		11
8	Дизайн флуоресцентних міток для дослідження біооб'єктів – дизайн та синтез	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, 1996.

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

Додаткова:

[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.