

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
Львівський національний університет імені Івана Франка
Факультет хімічний
Кафедра органічної хімії

Затверджено
На засіданні кафедри органічної хімії
хімічного факультету Львівського
національного університету імені Івана
Франка (протокол № 1 від 30.08.2022 р.)



Завідувач кафедри органічної хімії
Микола ОБУШАК

Силабус з навчальної дисципліни
«Молекулярний дизайн»,
що викладається в межах ОПП
другого (магістерського) рівня вищої освіти
для здобувачів зі спеціальності 102 Хімія

Назва дисципліни	Молекулярний дизайн
Адреса викладання дисципліни	вул. Кирила і Мефодія 6, 79005 Львів
Факультет та кафедра, за якою закріплена дисципліна	хімічний факультет, кафедра органічної хімії
Галузь знань, шифр та назва спеціальності	10 Природничі науки, спеціальність 102 «Хімія»
Викладачі дисципліни	Тупичак Микола Анатолійович, доктор філософії, асистент кафедри органічної хімії
Контактна інформація викладачів	Mykola.Tupychak@lnu.edu.ua
Консультації з питань навчання по дисципліні відбуваються	Консультації в день проведення лекцій/лабораторних занять (за попередньою домовленістю). Можливі онлайн консультації; для погодження часу їх проведення слід писати на електронну адресу викладача
Сторінка курсу	https://chem.lnu.edu.ua/course/molekulyarnyj-dyzajn
Інформація про дисципліну	Дисципліна «Молекулярний дизайн» є вибірковою для ОПІ «Хімія» другого (магістерського) рівня освіти зі спеціальності «Хімія», яку слухають у 1 семестрі. Обсяг дисципліни – 4 кредити ЄКТС
Коротка анотація дисципліни	Навчальну дисципліну «Молекулярний дизайн» розроблено таким чином, щоб надати здобувачам необхідні знання, які дозволять сформувавши цілісну систему новітніх знань з органічної хімії, ознайомити з теорією і практикою сучасних методів одержання і хімічних перетворень органічних сполук, формувати нетрадиційні підходи до системи знань з органічної хімії, формувати уявлення про взаємозв'язок будови та реакційної здатності органічних сполук на основі сучасних літературних даних
Мета та цілі дисципліни	Метою і завданням навчальної дисципліни «Молекулярний дизайн» є ознайомлення студентів з основними положеннями структурно-орієнтованого та функціонально-орієнтованого молекулярного дизайну, формування цілісного світогляду щодо можливостей органічного синтезу. Це створення нових структур, проблемних для органічної хімії, ознайомлення з "аномальними" структурами в органічній хімії, використання молекулярних конструкцій для виявлення механізмів дії біологічно активних сполук, формування уявлення про нові біологічні матеріали на основі досягнень молекулярного дизайну.
Література для вивчення дисципліни	<p style="text-align: center;">Основна література</p> <ol style="list-style-type: none"> Григоренко О., Шабликін О. Сучасні методи органічного синтезу. К.: Наш формат. 2021. 568 с. Пивоваренко В. Основи супрамолекулярної хімії (Рукопис, частина 1). 2022. 99 с. Коритко О.О., Обушак М.Д. Теоретичні основи будови органічних сполук. Львів, 2021. 53 с. <p>Допоміжна</p> <ol style="list-style-type: none"> Шиванюк О.М. Супрамолекулярна хімія функціональних

	<p>каліксаренів. К.: Наукова думка. 2007. 232 с.</p> <p>2. Mukherjee P. S., Chakraborty, D. Recent trends in organic cage synthesis: push towards water-soluble organic cages. <i>Chem. Commun.</i>, 2022, 58, 5558-5573. https://doi.org/10.1039/D2CC01014C</p> <p>3. Qu Z., Cheng S. Z., Zhang, W. B. Macromolecular topology engineering. <i>Trends in Chemistry</i>, 2021, 3(5), 402-415. https://doi.org/10.1016/j.trechm.2021.02.002</p> <p>4. Dey S., Fan C., Gothelf K.V. et al. DNA origami. <i>Nat Rev Methods Primers</i>, 2021, 1, 13. https://doi.org/10.1038/s43586-020-00009-8</p> <p>5. Herges, R. Topology in chemistry: designing Möbius molecules. <i>Chem. Rev.</i>, 2006, 106(12), 4820-4842. https://doi.org/10.1021/cr0505425</p> <p>6. Сайт колекції тотальних синтезів проф. Г. Райха, https://organicchemistrydata.org/hansreich/resources/syntheses .</p>
Тривалість курсу	120 год
Обсяг курсу	32 години аудиторних занять. З них 16 годин лекцій, 16 годин лабораторних робіт. 88 годин самостійної роботи
Очікувані результати навчання	<p>Після завершення цього курсу студент повинен</p> <p><i>знати:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> – підходи до конструювання каркасних молекул; – моделювання молекул з топологічним зв'язком; – принципи проведення асиметричного синтезу; – підходи до синтезу та застосування краун-етерів; – формування деревовидних молекул; <p><i>вміти:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> – опрацьовувати сучасну оригінальну літературу за заданою тематикою; – готувати презентації на теми курсу; – прогнозувати можливості конструювання молекул нетрадиційної будови; – прогнозувати можливе використання нових молекулярних конструкцій; – виконувати квантово-хімічні розрахунки молекул. <p>У результаті успішного вивчення курсу студент набуде <i>загальних компетентностей:</i></p> <p>ЗК 2. Здатність вчитися і оволодівати сучасними знаннями.</p> <p>ЗК 3. Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу.</p> <p>ЗК 6. Здатність генерувати нові ідеї (креативність).</p> <p>ЗК 7. Здатність використовувати інформаційні та комунікаційні технології.</p> <p>ЗК 14. Здатність до пошуку, критичного аналізу та обробки інформації з різних джерел.</p> <p><i>та спеціальних (фахових) компетентностей:</i></p> <p>СК 1. Здатність використовувати закони, теорії та концепції хімії у поєднанні із вищого рівня математичними інструментами для опису природних явищ.</p> <p>СК 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.</p> <p>СК 4. Здатність інтерпретувати, об'єктивно оцінювати і</p>

	<p>презентувати результати свого дослідження.</p> <p>СК 5. Здатність застосовувати методи комп'ютерного моделювання для вирішення наукових, хіміко-технологічних проблем та проблем хімічного матеріалознавства.</p> <p>СК 6. Здатність здобувати нові знання в галузі хімії та інтегрувати їх із уже наявними.</p> <p><i>Програмні результати навчання:</i></p> <p>ПРН 1 Знати і розуміти наукові концепції та сучасні теорії хімії, а також фундаментальні основи суміжних наук.</p> <p>ПРН 2 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.</p> <p>ПРН 5 Володіти методами комп'ютерного моделювання структури, параметрів і динаміки хімічних систем.</p> <p>ПРН 8 Вміти ясно і однозначно донести результати власного дослідження до фахової аудиторії та/або нефаківців</p> <p>ПРН 9 Збирати, оцінювати та аналізувати дані, необхідні для розв'язання складних задач хімії, використовуючи необхідні методи та інструменти роботи з даними.</p>
Ключові слова	<i>Структурно-орієнтований молекулярний дизайн, функціонально-орієнтований молекулярний дизайн, жорсткі каркасні системи, деревовидні молекули, краун-етери, декстрини, синтези «у порожнині».</i>
Формат курсу	Очний
	Проведення лекцій, лабораторних робіт та консультацій для кращого розуміння тем
Теми	Подано у таблиці
Підсумковий контроль, форма	Залік у кінці семестру, на підставі всіх видів контролю
Пререквізити	Для вивчення курсу студенти потребують базових знань з дисципліни «Органічна хімія», достатніх для сприйняття категоріального апарату.
Навчальні методи та техніки, які будуть використовуватися під час викладання курсу	Презентація, лекції, колаборативне навчання (форми – групові проекти, спільні розробки), творче індивідуальне завдання, дискусія. Робота в системі Moodle, Microsoft Teams, побудова електронного навчання як простору прояву пізнавальних ініціатив.
Необхідне обладнання	Персональний комп'ютер, загальноживані комп'ютерні програми, проектор, доступ до мережі інтернет. Обладнання для виконання лабораторних робіт.
Критерії оцінювання (окремо для кожного виду навчальної діяльності)	Політика виставлення балів. Враховуються бали, набрані на лабораторних роботах, поточному тестуванні, самостійній роботі та бали підсумкового тестування. Оцінювання проводиться за 100-бальною шкалою. Бали нараховуються за наступним співвідношенням: <ul style="list-style-type: none"> • виконання та захист лабораторних робіт: 40% семестрової оцінки; • виконання та захист реферативної роботи: 10% семестрової оцінки; • підсумкове тестування (колоквіум): 50% семестрової оцінки.

	<p>Підсумкова максимальна кількість балів – 100.</p> <p>Відвідання занять: Здобувачі повинні відвідувати усі лекції і лабораторні заняття курсу та мають інформувати викладача про неможливість відвідати заняття з поважних причин.</p> <p>Література. Уся література, яку здобувачі не зможуть знайти самостійно, буде надана викладачем винятково в освітніх цілях без права її передачі третім особам.</p> <p>Жодні форми порушення академічної доброчесності не толеруються.</p>
Питання до заліку чи екзамену.	Див. Біла Є.Є. Методичні рекомендації до самостійної роботи з дисципліни «Молекулярний дизайн» для студентів хімічного факультету. В-во МВЦ Львів: ЛНУ ім. І.Франка. 2018. 38с
Опитування	Анкету-оцінку з метою оцінювання якості курсу буде надано по завершенню курсу.

Схема курсу
Лекційний курс навчальної дисципліни
ЛЕКЦІЙНИЙ КУРС
1 семестр

№ тем	НАЗВИ ТЕМ	Кількість годин			
		Σ	лк	лаб	сп
1	Молекулярний дизайн. Створення нових структур, проблемних для органічної хімії. Платонові вуглеводні та споріднені структури. Кубан. Кінетична та термодинамічна стабільність молекули. Одержання. Хімічні перетворення.		2	2	11
2	Системи на основі тетраедрану. Проблеми стабільності. "Корсетний ефект". Гомоароматичність. Утворення катіон-радикалів. Додекаедран. Синтез додекаедрану. Особливості хімічної поведінки додекаедрану. Термодинамічна стабільність і висока реакційна здатність. Хімічні перетворення додекаедрану.		2	2	11
3	Деревовидні молекули. Основні підходи до синтезу дендримерів. Стратегія синтезу. Дивергентний синтез, синтез від периферії до центру. Дендримерні молекули з центральним атомом карбону. Дендримерні молекули з центральним атомом нітрогену.		2	2	11
4	Сполуки з топологічним зв'язком. Катенани, ротаксани. Основні стратегічні підходи при вирішенні синтетичних завдань.		2	2	11
5	Основні положення теорії гібридизації атомних орбіталей. Межі спотворення валентних кутів, величин хімічних зв'язків. Проблеми деформації подвійного зв'язку. Деформовані подвійні зв'язки малих циклів. Кут пірамідалізації. Циклопропен. Біцикло-[2.2.0]-1-гексен.		2	2	11
6	Мета і завдання функціонально-орієнтованого молекулярного дизайну. Кореляція „структура-властивість”. Синтез нуклеофільних основ. Основи Хьюніга. Одержання макроциклічних етерів. Синтез Петерсена. Краун-етери. Криптанди. Енантіоспецифічні синтези. Синтези на жорсткій матриці. Асиметричний синтез. Методи розділення оптичних антиподів.		2	2	11
7	Синтези у порожнині – "молекулярному посуді". Реакції у інвертованих міцелах. Використання циклодекстринів для фіксації реагентів. Дизайн комплексів "гість-господар". Тривимірні фіксація реагентів. Сферанди. Кавітанди. Каліксарени. Карцеранди. Карцеплекси		2	2	11
8	Створення "керованих" молекул як основний напрямок молекулярного дизайну. 1,4-Дегідробензен. Реакційна здатність. Роботи Бергмана. Циклоароматизація. Керована функціоналізація в органічній хімії. Керована віддалена функціоналізація насиченого центру. Підходи Бреслоу. Вибір довжини спейсера для окислення конкретних положень холестеринового скелету.		2	2	11
Разом		120	16	16	88

ЛАБОРАТОРНІ ЗАНЯТТЯ

№ з/п	Назва теми	Кількість аудиторних годин
ЗМІСТОВИЙ МОДУЛЬ		
1	Стратегія формування малих, середніх та великих циклів. Підходи до формування молекул з третинними атомами карбону у голові мостикових структур.	2
2	Конструювання каркасних молекул. Квантово-хімічний розрахунок каркасних молекул методами АМ1, ППП. Стереохімічні зображення розрахованих молекул.	2
3	Основні методологічні підходи до синтезу дендримерів. Квантово-хімічний розрахунок дендримерів.	2
4	Моделювання молекул з топологічним зв'язком. Стратегія формування катенанів та ротаксанів. Квантово-хімічний розрахунок пропеланів, фенестранів, циклофанів. Стереохімічні зображення розрахованих молекул.	2
5	Конструювання молекул із деформованими величинами довжин хімічних зв'язків та валентних кутів. Підходи до формування нетрадиційних органічних молекул.	2
6	Краун-етери як каталізатори хімічних перетворень. Синтези краун-етерів. Асиметричний синтез амінокислот. Синтез Корі. Моделювання асиметричного синтезу амінокислот за допомогою програми.	2
7	Темплатні синтези. Основні підходи і принципи реалізації. Нові підходи до синтезу кортикостероїдних препаратів.	2
8	Керована функціоналізація. Основні підходи до створення молекулярних машин. Хімічні "перемикачі" на основі азосполук з макроциклічними фрагментами. Модульна контрольна робота.	2
	Разом	16

САМОСТІЙНА РОБОТА СТУДЕНТА

№ з/п	Назва змістового модуля	Кількість годин
ЗМІСТОВИЙ МОДУЛЬ		
1	Молекулярне розпізнавання. Класифікація супрамолекулярних сполук. Комплементарність. Природа супрамолекулярних взаємодій. Вияснення закономірностей "структура – властивості" органічних сполук.	11
2	Фулерени. Будова. Реакційна здатність. Шляхи практичного використання. Полімери на основі фулерену.	11
3	Зіркоподібні дендримери. Дендримери на основі металоценів. Арбароли. Методи синтезу. Органічні тектони.	11
4	Вузли. Підходи до синтезу вузлових молекул. Формування потрійного вузла.	11
5	Ферментативний каталіз. Підходи до вирішення питання високої швидкості і абсолютної селективності в органічному синтезі. Ефекти	11

	зближення реакційних центрів. Роботи Менгера, Ладики, Бартона..	
6	Проблеми поєднання хімічних властивостей та структурних особливостей для розробки протипухлинних препаратів. Синтез альдостерону	11
7	Використання молекулярних конструкцій для в'яснення механізмів дії гемоглобіну, синтезу жирних кислот, холестерину, створення "блакитної крові". Внутрішньоклітинна хімія.	11
8	Створення нових біологічних матеріалів на основі досягнень молекулярного дизайну та в'яснення механізмів біохімічних перетворень. Молекулярні машини.	11
	Разом	88