

# КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

## Інститут високих технологій Кафедра супрамолекулярної хімії

«ЗАТВЕРДЖУЮ»  
Директор інституту високих технологій  
В.В.Ільченко  
«01» 09 2017 року

### РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

#### Сучасні аспекти супрамолекулярної хімії

для здобувачів наукового ступеня доктор філософії

галузь знань	10 Природничі науки
спеціальність	102 Хімія
рівень вищої освіти освітньо-наукова програма	третій освітньо-науковий "Хімія"
вид дисципліни	<b>вибіркова</b>

Форма навчання - очна, заочна  
Навчальний рік - 2017/2018  
Курс - 2, півріччя - 2  
Кількість кредитів ECTS - 4  
Мова викладання, навчання  
та оцінювання - українська  
Форма заключного контролю - іспит

#### Викладач:

**Шиванюк Олександр Миколайович**, доктор хімічних наук, професор кафедри супрамолекулярної хімії

Пролонговано: на 2018/2019 н.р. Шиванюк О.М. (Фолієвський) «30» 08 2018 р. д.р. №1  
на 2019/2020 н.р. Шиванюк О.М. (Гусінічук) «07» 03 2019 р. д.р. №4

КИЇВ – 2017

**Розробник:**

**Шиванюк Олександр Миколайович**, доктор хімічних наук, професор кафедри супрамолекулярної хімії

**«ПОГОДЖЕНО»**

Завідувач кафедри супрамолекулярної хімії  
\_\_\_\_\_ І.В. Комаров

Протокол № 1 від «30» світлого 2017 р.

Схвалено науково-методичною комісією інституту високих технологій

Протокол № 1 від «29» 08 2017р.

Голова науково-методичної комісії

*А.М.С.*

О.К. Колежук

«29» 08 2017 року.

**1. Мета дисципліни:** Курс "Сучасні аспекти супрамолекулярної хімії" ставить за мету ознайомити аспірантів з останніми досягненнями супрамолекулярної хімії та технологіями, що базуються на її основі.

**2. Попередні вимоги до опанування або вибору навчальної дисципліни:**

Програма курсу побудована на засадах інтеграції та синтезу попередньо набутих знань. Аспіранти можуть успішно засвоїти дану дисципліну за умови наявності у них базових знань з хімії біохімії та молекулярного моделювання.

**3. Анотація навчальної дисципліни:**

Предметом навчальної дисципліни "Сучасні аспекти супрамолекулярної хімії" є методи цілеспрямованого створення молекул здатних утворювати функціональні нековалентні агрегати, що мають корисні властивості.

Оскільки дана навчальна дисципліна вимагає поєднання знань різних галузей науки, її викладання починається з повторення відповідних розділів хімії, біохімії, та молекулярного моделювання.

Основна частина навчальної дисципліни викладається на прикладах створення ефективних та селективних мономолекулярних рецепторів на катіони, аніони та нейтральні молекули, а також створення молекул здатних самочинно утворювати нековалентні функціональні агрегати.

Нові технології демонструються на прикладах створення йон-селективних електродів, сенсорів, селективних екстрактантів, міжфазних каталізаторів, нанореакторів та молекулярних машин.

**4. Завдання (навчальні цілі):**

Курс передбачає формування теоретичного фундаменту і ознайомлення з

1. теорією нековалентних взаємодій
2. основними принципами побудови супрамолекулярних структур,
3. методами дослідження структури та стабільності супрамолекулярних комплексів,
4. методами біологічного скринінгу сполук комбінаторних бібліотек.

По закінченню курсу *аспірант повинен знати:*

- нековалентні взаємодії та їх роль в різних галузях природознавства.
- методи створення молекулярних рецепторів катіонів, аніонів та нейтральних молекули.
- методи створення само-складальних функціональних агрегатів
- методи дослідження структури та стійкості супрамолекулярних комплексів та агрегатів.

По закінченню курсу *аспірант повинен вміти:*

- виявляти нековаалентні взаємодії, що стабілізують супрамолекулярні комплекси та агрегати, оцінювати вклад кожного типу взаємодій в стабільність супрамолекулярних структур,
- розраховувати супрамолекулярні структури за допомогою методів молекулярної механіки та квантової хімії.
- орієнтуватись у сучасних методах і підходах супрамолекулярної хімії та органічного матеріалознавства.

## 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			
<b>1</b>	аспірант повинен <b>знати</b> :	лекційні заняття	письмові модульні контрольні роботи, оцінювання виконання завдань для самостійної роботи	до 45
1.1	Типи нековалентних взаємодій та їх роль в Природі.	<i>лекція</i>	письмові модульні контрольні роботи, оцінювання виконання завдань для самостійної роботи	
1.2	Методи створення молекулярних рецепторів для йонів та нейтральних молекул.	<i>лекція</i>	=//=	
1.3	Методи створення стабільних самозбірних функціональних молекулярних агрегатів.	<i>лекція</i>	=//=	
1.4	Методи вивчення структури, стабільності та динаміки супрамолекулярних агрегатів.	<i>лекція</i>	=//=	
<b>2</b>	аспірант повинен <b>вміти</b> :	лекційні заняття	письмові модульні контрольні роботи, оцінювання виконання завдань для самостійної роботи	до 45
2.1	Проводити розрахунки супрамолекулярних структур методами молекулярної механіки та квантової хімії.	=//=	=//=	
2.2	Працювати з сучасними оригінальними публікаціями із супрамолекулярної хімії.	=//=	=//=	
<b>3</b>	<b>комунікація</b>	лекційні заняття		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	
<b>4</b>	<b>автономність та відповідальність</b>	лекційні заняття	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 і успішної здачі всіх лабораторних робіт наступний:

- результати навчання 1.1 – 1.4 [знання] до 45 %;
- результат навчання 2.1 – 2.2 [вміння] – до 45%;
- результат навчання 3.1-3.2 [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 №7 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:*

	<b>ЗМ</b>	
	<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	березень
Виступ на семінарі	березень
Виконання аспірантами самостійних робіт	лютий- травень
Добір балів/додаткова контрольна робота та/або доскладання домашніх завдань	травень
Іспит	травень

Розрахунок балів, які аспірант отримує при успішній здачі заліку:

	Змістовий модуль	Іспит	Підсумкова оцінка
Мінімум	36	24	60
Максимум	60	40	100

### 7.3. Шкала відповідності оцінок

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

### 8. Структура навчальної дисципліни. Тематичний план лекційних занять

№ з/п	Назва теми	У тому числі		
		Лекції	Практичні заняття	Самостійна робота
1	Вступ до супрамолекулярної хімії. Типи нековалентних взаємодій та їх роль в Природі. Принципи побудови природних та штучних функціональних молекул. Ковалентний та нековалентний синтез.	2		8
2	Основні концепції супрамолекулярної хімії. Молекулярне розпізнавання, самоскладання на прикладі природних та синтетичних сполук. Молекулярна перед-організація функціональних груп як ефективний підхід до створення селективних і ефективних рецепторів та стабільних агрегатів.	2		8
3	Основні типи молекулярних платформ, їх синтез, будова та хімічні модифікації. Каліксарени, циклотрикатехілени, порфірини, клікспіроли та циклодекстрини. Приклади використання молекулярних платформ для створення ефективних рецепторів та стабільних агрегатів.	2		14
4	Дизайн, синтез та властивості молекулярних рецепторів катіонів. Зв'язування катіонів подандами, коронандами, криптандами та сферандами.	2	2	8
5	Дизайн, синтез та властивості молекулярних рецепторів аніонів. Використання іонних, водневих та координаційних зв'язків для молекулярного розпізнавання аніонів.	2		8
6	Дизайн, синтез та властивості молекулярних рецепторів нейтральних	2		14

	молекул. Зв'язування та стабілізація молекул гостей кавітандами, карцерандами та гемікарцерандами.			
7	Молекулярний дизайн, синтез та самоскладання воденво зв'язаних молекулярних капсул. Рецепторні властивості димерних, тетрамерних та гексамерних капсул в розчинах та кристалічному стані.	2	2	14
8	Металокоординаційні супрамолекулярні структури.	2		12
9	Дизайн синтез та властивості високо-розгалуджених молекул – дендримерів. Супрамолекулярний підхід до створення структур з механічними зв'язками – катенанів, ротаксанів та вузлів. Молекулярні шатли та машини.	2		10
	<b>ЗАГАЛОМ</b>	<b>18</b>	<b>4</b>	<b>96</b>

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:**

Основна:

1. J.-M. Lehn *Supramolecular Chemistry*, 1995, *Wiley-VCH*. ISBN 978-3-527-29311-7.

2. D. J. Cram, J. M. Cram 1997, *Container Molecules and Their Guests*. The Royal Society of Chemistry, ISBN 0-85404-507-4.

3. M. Smith, J. March *March's Advanced Organic Chemistry. Reactions, Mechanisms and Structure*, Sixth Edition, Willey interscience 2007, Chapter 3.

### **Додаткова:**

Шиванюк О.М. *Супрамолекулярна хімія функціональних каліксаренів*. Наукова думка 2007, Київ.