

Розробник:

Григоренко Олександр Олегович, д.х.н., професор, завідувач кафедри органічної хімії

ЗАТВЕРДЖЕНО

Завідувач кафедри органічної хімії

 Олександр ГРИГОРЕНКО

Протокол № 15 від 5 травня 2025 року

Схвалено науково-методичною комісією хімічного факультету

Протокол № 9 від 7 травня 2025 року

Голова науково-методичної комісії  Олександр РОЇК

« 7 » травня 2025 року

1. Мета дисципліни – розвинути, доповнити та закріпити знання про методи та планування синтезу sp^3 -збагачених циклічних сполук.

2. Попередні вимоги до опанування або вибору навчальної дисципліни:

1. Знати органічну хімію на рівні бакалавра за спеціальністю «Хімія».
2. Володіти навичками написання органічних реакцій.
3. Мати уявлення про стереохімію на рівні бакалавра за спеціальністю «Хімія».
4. Володіти навичками написання механізмів органічних реакцій на рівні бакалавра за спеціальністю «Хімія».

3. Анотація навчальної дисципліни. В рамках курсу «Синтез sp^3 -збагачених циклічних систем» вивчаються методи органічного синтезу, що дозволяють здійснювати sp^3 -збагачених карбо- та гетероциклів, механізми реакцій, що використовуються, їх стереохімічні особливості. Вивчаються реакції циклізації та перициклічні реакції, методи утворення аліциклічних систем (циклопропанів, циклобутанів, циклопентанів, циклогексанів), піролідинів та інших sp^3 -збагачених гетероциклічних систем.

4. Завдання. Завданням дисципліни є поглиблене вивчення особливостей синтезу і властивостей sp^3 -збагачених циклічних систем як інструменту для створення новітніх практично корисних сполук.

Дисципліна спрямована на досягнення таких загальних та спеціальних (фахових) компетентностей:

ЗК1 (знання та розуміння предметної області та розуміння професійної діяльності),

ЗК4 (здатність застосовувати знання у практичних ситуаціях),

ЗК14 (здатність до пошуку, критичного аналізу та обробки інформації з різних джерел),

ФК3 (здатність організовувати, планувати та реалізовувати хімічний експеримент),

ФК9 (здатність обирати оптимальні методи та методики дослідження),

ФК13.4 (здатність планувати та здійснювати синтез органічних речовин, здійснювати дизайн органічних молекул з бажаними властивостями),

ФК14.4 (здатність доводити будову та визначати властивості органічних речовин за допомогою сучасних фізико-хімічних методів дослідження).

5. Результати навчання за дисципліною:

Код	Результат навчання (1 – знати; 2 – вміти; 3 – комунікація; 4 – автономність та відповідальність)	Форми (та/або методи і технології) викладання і навчання	Методи оцінювання поточний контроль (написання контрольних робіт ПтК-1 та ПтК-2), підсумковий контроль ПсК	Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни
1.1	Знати сферу застосування комп'ютерних методів в сучасній органічній хімії	лекції, самостійні	ПтК-1, ПсК	15
1.2	Знати основні принципи та засади комп'ютерного моделювання молекул та процесів	лекції, самостійні	ПтК-2, ПсК	25
1.3	Знати можливості сучасних комп'ютерних програм у вирішенні науково-прикладних задач	лекції, самостійні	ПтК-1, ПсК	10
2.1	Уміти проводити квантово-хімічні розрахунки енергії конформерів та енергії в хімічних перетвореннях	лекції, самостійні	ПтК-2, ПсК	10
2.2	Уміти аналізувати електронну та просторову будову органічних сполук	лекції, самостійні	ПтК-1, ПсК	10

2.3	Уміти аналізувати вплив середовища на електронну та просторову будову органічних сполук	лекції, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	10
3.1	Бути використовувати сучасні інформаційно-комунікаційні технології при спілкуванні, а також для збору, аналізу, обробки, інтерпретації інформації у галузі органічної хімії та хімічного моделювання	самостійні	ПтК-1, ПтК-2	5
3.2	Бути здатним виконувати передбачені навчальною програмою завдання у співпраці з іншими виконавцями	самостійні	ПтК-1, ПтК-2	5
4.1	Уміти самостійно зафіксувати, проаналізувати та інтерпретувати експериментальні та розрахункові дані	самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	5
4.2	Дотримуватися правил наукової етики та доброчесності в процесі критичної обробки наявної та створенні нової інформації у галузі комп'ютерної хімії	самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	5

6. Співвідношення результатів навчання дисципліни із програмними результатами навчання:

Програмні результати навчання	Результати навчання дисципліни	1.1	1.2	1.3	2.1	2.2	2.3	3.1	3.2	4.1	4.2
P19.4. Планувати та здійснювати синтез органічних речовин, здійснювати дизайн органічних молекул з бажаними властивостями		+	+	+	+	+	+	+	+	+	+
P20.4. Доводити будову та визначати властивості органічних речовин за допомогою сучасних фізико-хімічних методів дослідження		+	+	+	+	+	+	+	+	+	+

7. Схема формування оцінки

7.1. Форми оцінювання студентів:

Семестрове оцінювання:

Максимальна/мінімальна кількість балів, які можуть бути отримані студентом(кою): **60 балів / 36 балів**, а саме:

1. Контрольна робота 1: РН 1.1, 1.3, 2.2, 2.3, 3.1, 3.2, 4.1, 4.2 (частково) – **30 / 18 балів**
2. Контрольна робота 2: РН 1.2, 2.1, 2.3, 3.1, 3.2, 4.1, 4.2 (частково) – **30 / 18 балів**

Підсумкове оцінювання (у формі екзамену):

Максимальна/мінімальна кількість балів, які можуть бути отримані студентом(кою): **40 балів / 24 бали**.

Результати навчання які будуть оцінюватись: РН 1.1, 1.2, 1.3, 2.1, 2.2, 2.3, 4.1, 4.2.

Форма проведення: письмова робота.

Види завдань: 2 теоретичні питання, 1 задача (розшифровка синтетичної схеми).

Для отримання загальної позитивної оцінки з дисципліни оцінка за екзамен не може бути меншою 24 балів.

Студент(ка) допускається до іспиту, якщо протягом семестру він (вона):
набрав(ла) не менше, ніж **36 балів**;
написав(ла) обидві контрольні роботи.

7.2. Організація оцінювання

Терміни проведення оцінювання:

- Контрольна робота 1: не раніше 6 тижня семестру;
- Контрольна робота 2: не раніше 12 тижня семестру;
- Оцінювання самостійної роботи: впродовж семестру.

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 лекцій

№	Назва лекції	лекції	самост. робота
1	Основні принципи роботи з програмою “Windows”. Програми пакету “Microsoft Office”. Програма з управління бібліографічними даними “Mendeley”	4	4
	<i>Бази даних наукової літератури</i>		4
2	Програми хімічної графіки “Chemwin”, “Chemsketch”, “Chemdraw”, “ISISdraw” та “MarvinSketch”	4	4
	<i>Програми хімічної графіки “BIOVIA Draw”, “Chemdoodle”</i>		4
3	Програма хімічного моделювання “ACD Lab”	4	4
	<i>Обробка та представлення спектральних даних в програмі “ACD Lab”</i>		5
4	Програма обліку речовин “ISISBase”	4	4
	<i>Робота з графічною програмою “Origin”</i>		5
5	Програма візуалізації та графічної обробки спектрів “MNova”	4	4
	<i>Програма візуалізації та графічної обробки спектрів “ADVASP”,</i>		5
6	Програма квантово-хімічних розрахунків “MOPAC”. Формат даних стартового файлу. Ключові слова. Проведення оптимізації геометрії молекули. Розрахунок торсійних енергій молекули та заселеності конформаційних станів. Розрахунок активаційних бар’єрів хімічних процесів.	4	4

	<i>Програма хімічного моделювання "HyperChem". Створення графічного зображення молекули</i>		5
7	Пошукові системи хімічних баз даних. Рейтинги, індекси, і сервіси для науковців	4	4
	<i>Наукометрія</i>		5
ВСЬОГО		28 + 1 ГОД КОНС.	61

Загальний обсяг **90 годин**, в тому числі:

Лекції – **28 годин**

Консультації – **1 година**

Самостійна робота – **61 година**

9. Рекомендовані джерела

Основні

1. Колендо О.Ю. Комп'ютерне моделювання органічних сполук і полімерів. – К.: ВПЦ Київський університет, 2017. – 80 с.
2. <http://openmopac.net/home.html>
3. https://en.wikipedia.org/wiki/Density_functional_theory

10. Додаткові ресурси:

Інтернет ресурси

<https://www.scopus.com/>
<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>
<https://worldwide.espacenet.com/>
<https://www.reaxys.com>
<https://www.sigmaaldrich.com/european-export.html>
<http://www.organic-chemistry.org/>
<https://www.fda.gov/>
http://www.aist.go.jp/aist_e/list/database/riodb/
<http://www.ccdc.cam.ac.uk/>
<https://organicchemistrydata.org/>