

КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ  
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

Хімічний факультет  
Кафедра органічної хімії

«ЗАТВЕРДЖУЮ»

Заступник декана  
з навчальної роботи



*Н.Усенко* Наталія УСЕНКО

«30» 06 2022 року

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ  
ВИБРАНІ РОЗДІЛИ ОРГАНІЧНОЇ ХІМІЇ

*для здобувачів освіти*

галузь знань	10 Природничі науки
спеціальність	102 Хімія
освітній рівень	бакалавр
освітня програма	Хімія
вид дисципліни	вибіркова

Форма навчання	денна
Навчальний рік	2022/2023
Семестр	6
Кількість кредитів ECTS	5
Мова викладання, навчання та оцінювання	українська
Форма заключного контролю	іспит

Викладачі: професор Пивоваренко Василь Георгійович,  
доцент Мілохов Демид Сергійович

Пролонговано: на 2023/2024 н. р. \_\_\_\_\_ (\_\_\_\_\_) «\_\_» \_\_\_\_\_ 20\_\_ р.  
на 2024/2025 н. р. \_\_\_\_\_ (\_\_\_\_\_) «\_\_» \_\_\_\_\_ 20\_\_ р.


КИЇВ - 2022

Розробники:

**Пивоваренко Василь Георгійович, проф., д.х.н., професор кафедри органічної хімії**  
**Мілохов Демид Сергійович, к.х.н., доцент кафедри органічної хімії**

ЗАТВЕРДЖЕНО

Завідувач кафедри органічної хімії

 \_\_\_\_\_ Володимир ХИЛІЯ

Протокол № 14 від «03» червня 2022 р.

Схвалено науково-методичною комісією хімічного факультету

Протокол № 7 від «29» червня 2022 року

Голова науково-методичної комісії  \_\_\_\_\_ Олександр ПОЇК

« 29 » червня 2022 року

**1. Мета дисципліни** – Навчити студентів повноцінно і професійно застосовувати сучасні комп'ютерні програми у навчанні та в наукових дослідженнях за спеціальністю. На практиці ознайомити з можливостями сучасних комп'ютерних програм у вирішенні науково-прикладних задач. Ознайомити студентів з теорією та властивостями розчинів органічних сполук, способами збільшення швидкості та вибіркості взаємодії, а також з їх реакційною здатністю у рідкій фазі.

**2. Попередні вимоги до опанування навчальної дисципліни:** Володіти базовими навиками роботи з комп'ютером. Знати основні поняття органічної хімії. Вміти зобразити формули органічних сполук. Володіти елементарними навичками написання органічних реакцій. Володіти базовими знаннями загальної хімії. Володіти навичками операцій в хімічній лабораторії.

**3. Анотація навчальної дисципліни.** Спецкурс «Вибрані розділи органічної хімії» складається з двох частин: «Комп'ютери в наукових дослідженнях» та «Органічні реакції в розчинах» Частина «Комп'ютери в наукових дослідженнях» призначена для практичного засвоєння студентами найбільш важливих і найбільш вживаних комп'ютерних програм обробки наукової інформації: як текстової, графічної або цифрової, так і змішаної. Серед програм, що вивчаються: “Word”, “Exel”, “Power Point”, “ChemWin”, “ChemDraw”, “ISIS Base”, “ADVASP”, “HyperChem”, “Morac” тощо. Практикуються 3D моделювання органічних молекул і квантово-хімічні розрахунки хімічної реакції та конформаційних перетворень. Частина «Органічні реакції в розчинах» призначена для поглибленого вивчення теорії органічних реакцій у аспектах, що стосуються міжмолекулярних взаємодій органічних сполук у розчинах, змін електронної будови органічних молекул у залежності від фізико-хімічних властивостей молекул оточення, а також від інших умов: ультразвукового та мікрохвильового поля тощо.

**4. Завдання** – практичне засвоєння студентами найбільш важливих і найбільш вживаних комп'ютерних програм обробки наукової інформації: як текстової, графічної або цифрової, так і змішаної. Навчити студентів повноцінно і професійно застосовувати сучасні комп'ютерні програми у навчанні та в наукових дослідженнях. На практиці ознайомити з можливостями сучасних комп'ютерних програм у вирішенні науково-прикладних задач. Засвоєння студентами теорії розчинів органічних сполук, способів збільшення швидкості та вибіркості взаємодії реагентів, зміни їх реакційної здатності у рідкій фазі. Вміння передбачати результат реакції на основі аналізу просторової та електронної будови молекули. Згідно з вимогами Стандарту вищої освіти України (перший (бакалаврський) рівень вищої освіти, галузь знань 10 «Природничі науки», спеціальність 102 – «Хімія») навчальна дисципліна спрямована на досягнення наступних загальних та спеціальних (фахових) компетентностей: ЗК1, ЗК2, ЗК3, ЗК9 та СК4, СК6, СК10.

### 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 (активність під час практичних робіт ПтК-1 та контроль самостійної роботи ПтК-2), підсумковий контроль ПсК	Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни
1.1	Знати загальні уявлення про міжмолекулярні взаємодії в газовій та конденсованій фазах.	лекції, самостійні	ПтК-2, ПсК	10

1.2	Знати механізм впливу електромагнітного опромінення на властивості на середовища та реагентів , апаратне оформлення та застосування.	лекції, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	10
1.3	Знати механізм впливу ультразвуку на середовище та реагенти, апаратне оформлення та застосування.	лекції, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	10
1.4	Знати можливості сучасних комп'ютерних програм у вирішенні науково-прикладних задач.	лекції, практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	20
2.1	Знайти у першоджерелах інформацію про будову, синтез та властивості та застосування хімічних сполук	практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	7
2.2	Уміти проводити квантово-хімічні розрахунки енергії конформерів та енергії в хімічних перетвореннях	лекції, практичні, самостійні	ПтК-1	7
2.3	Уміти аналізувати електронну та просторову будову органічних сполук	лекції, практичні, самостійні	ПтК-1	7
2.4	Уміти аналізувати вплив середовища на електронну та просторову будову органічних сполук	лекції, практичні, самостійні	ПтК-1	7
2.5	Здійснювати операції в середовищі сучасних комп'ютерних програм при вирішенні науково-прикладних задач	лекції, практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	7
3.1	Здатність використовувати сучасні інформаційно-комунікаційні технології при спілкуванні, а також для збору, аналізу, обробки, інтерпретації інформації у галузі органічної хімії та хімічного моделювання	лекції, практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	4
3.2	Здатність виконувати передбачені навчальною програмою завдання та операції у співпраці з іншими виконавцями	практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	4
4.1	Уміти самостійно фіксувати, інтерпретувати та відтворити результати експерименту	практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	3
4.2	Уміти самостійно інтерпретувати механізм хімічної взаємодії	лабораторні, самостійні	ПтК-1, ПсК	4

**6. Співвідношення результатів навчання дисципліни (РНД) із програмними результатами навчання (ПРН):**

ПРН	РНД (код)	1.1	1.2	1.3	1.4	2.1	2.2	2.3	2.4	2.5	3.1	3.2	4.1	4.2
	Р07. Застосовувати основні принципи квантової механіки для опису будови атома, молекул та хімічного зв'язку.					+	+	+	+		+			
	Р15. Спроможність використовувати набуті знання та вміння для розрахунків, відображення та моделювання хімічних систем та процесів, обробки експериментальних даних.	+	+	+	+				+	+	+		+	+
	Р16. Виконувати комп'ютерні обчислення, що мають відношення до хімічних проблем, використовуючи стандартне та спеціальне програмне забезпечення, навички аналізу та відображення результатів.						+	+	+	+			+	+
	Р19. Використовувати свої знання, розуміння, компетенції та базові інженерно-технологічні навички на практиці для вирішення задач та проблем відомої природи.	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+
	Р21. Здійснювати моніторинг та аналіз наукових джерел інформації та фахової літератури.				+						+			
	Р24. Використовувати сучасні інформаційно-комунікаційні технології при спілкуванні, а також для збору, аналізу, обробки, інтерпретації даних.	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+

**7. Схема формування оцінки**

**7.1. Форми оцінювання студентів:**

**Семестрове оцінювання:**

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

1. Активність під час занять – виконання практичних робіт, виконання домашньої самостійної роботи: РН 1.1–1.4, РН 2.1 (частково); РН 2.2–2.4 (повністю); РН 2.5, РН 3.1, РН 3.2, РН 4.1, РН 4.2 (частково) – **40/24 балів**.
2. Контрольна робота № 1: РН 1.1–1.4, РН 2.1, РН 2.5, РН 3.1, РН 3.2, РН 4.1, РН 4.2 (частково) – **5/3 балів**.
3. Контрольна робота № 2: РН 1.1–1.4, РН 2.1, РН 2.5, РН 3.1, РН 3.2, РН 4.1, РН 4.2 (частково) – **5/3 балів**.
4. Оцінювання самостійної роботи: РН 1.1–1.4, РН 2.1, РН 2.5, РН 3.1, РН 3.2, РН 4.1 – **10/6 балів**.

### Підсумкове оцінювання (у формі іспиту):

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

Результати навчання які будуть оцінюватись: РН 1.1–1.4, РН 2.1, РН 2.5, РН 3.1, РН 3.2, РН 4.1, РН 4.2.

Форма проведення: письмова робота.

Види завдань: 4 письмових завдань (2 теоретичних питання та 2 практичних завдання).

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

Студент допускається до іспиту, якщо протягом семестру він:

набрав не менше, ніж **36 балів**;

виконав і вчасно здав всі практичні роботи;

виконав завдання самостійної роботи;

написав контрольні роботи.

### 7.2. Організація оцінювання:

Терміни проведення оцінювання:

Контрольна робота № 1: після проходження тем 1–7;

Контрольна робота № 2: після проходження тем 8–14;

Практичні роботи: оцінювання не пізніше 1 тижня після виконання;

Оцінювання самостійної роботи: впродовж семестру.

Студенти мають право на одне перескладання контрольної роботи у визначений викладачем термін.

### 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 лекцій і практичних занять

№ з/п	Назва теми	Кількість годин		
		лекції	практ.	С/Р
<i>Розділ 1</i>				
1	Основні принципи роботи з програмою “Windows”. Програми пакету “Microsoft Office”: “Word”, “Excel” та “Power point”. Програма з управління бібліографічними даними “Mendeley”.	1	2	6
2	Програми хімічної графіки “Chemwin”, “Chemsketch”, “Chemdraw”, “ISISdraw”, “BIOVIA Draw”, “Chemdoodle” та “MarvinSketch”. Програма хімічного моделювання “ACD Lab”.	1	3	6
3	Програма обліку речовин “ISISBase”. Робота з графічною програмою “Origin”.	1	3	6

4	Програма візуалізації та графічної обробки спектрів “Nuts”, “ADVASP”, “MNova”.	2	3	6
5	Програма хімічного моделювання “HyperChem”. Створення графічного зображення молекули.	2	3	6
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.	2	3	6
7	Пошукові системи хімічних баз даних. Рейтинги, індекси, бази даних наукової літератури і сервіси для науковців.	2	3	7
	<i>Контрольна робота 1</i>	1		
	<i>Усього</i>	12	20	43
<b>Розділ 2</b>				
8	Вступ. Загальні уявлення про міжмолекулярні взаємодії в газовій та конденсованій фазах. Типи міжмолекулярних взаємодій у розчинах. Специфічні та неспецифічні взаємодії. Приклади. Енергії окремих типів міжмолекулярних взаємодій. Залежність енергії міжмолекулярних взаємодій від будови молекули, її геометрії, кількості атомів та природи атомів.	1	2	6
9	Комплекс типу донор електронної пари – акцептор електронної пари як необхідна передумова (післяумова) хімічної реакції. Приклади донорів та акцепторів електронної пари. Типи міжмолекулярних водневих зв’язків та їх вплив на поляризацію атомів. Гомодромні, антидромні та гетеродромні водневі зв’язки. Вода як приклад надмолекулярної воднево-зв’язаної рідини, її будова та пов’язані з цим особливі властивості.	1	3	6
10	Рідини. Енергія міжмолекулярних взаємодій і взаємна розчинність рідин. Вибіркова (переважна) сольватація. Типи рідин і моделі рідких фаз. Кількісні характеристики природи міжмолекулярних взаємодій та їх шкали: кислотність, основність, донорність водневого зв’язку, акцепторність водневого зв’язку, фізична та емпірична полярність. Густина енергії когезії молекул у розчині та її вплив на реакційну здатність.	1	3	6
11	Кількісні параметри полярності розчинників. Фізична шкала полярності середовища та її складові. Емпіричні шкали полярності середовища та їх складові. Сольватохромні барвники як стандарти шкал емпіричної полярності. Іонні розчинники. Параметри кислотності та основності органічних розчинників. Принцип лінійного співвідношення енергій сольватації та його проявлення у спектральних властивостях органічних сполук.	2	3	6
12	Кислотність та основність неводних розчинів органічних сполук. Залежність кислотно-основних властивостей сполуки від її будови. Теорія жорстких та м’яких кислот та основ (ЖМКО). Теорії кислот та основ Бренстеда-Лоурі та Льюїса. Загальний огляд кислотності та основності різних класів органічних сполук.	2	3	6

13	Мікрохвильовий синтез. Механізм впливу електромагнітного опромінення на властивості на середовища та реагентів. Принципи методу. Апаратне оформлення. Модифікації у практичному застосуванні мікрохвиль, їх переваги та недоліки. Класифікація розчинників у мікрохвильовому синтезі.	2	3	6
14	Сонохімія: ультразвук в органічному синтезі. Механізм впливу ультразвуку на середовище та реагенти. Апаратне оформлення та застосування. Модульна контрольна робота 3	2	3	7
	<i>Контрольна робота 2</i>	1		
	<i>Усього</i>	12	20	43
	<b>УСЬОГО</b>	<b>24</b>	<b>40</b>	<b>86</b>

Загальний обсяг 150 год, у тому числі:

Лекції – 24 год.

Практичні – 40 год.

Самостійна робота – 86 год.

## 9. Рекомендовані джерела

### Основні:

1. Пивоваренко В. Г. Механізми органічних реакцій у розчинах. – К.: ВПЦ Київський університет, 2019. – 304 с.
2. HyperChem for Windows. – New-York: Pergamon Press, 1992. – 297 p.
3. Колендо О.Ю. Комп'ютерне моделювання органічних сполук і полімерів. – К.: ВПЦ Київський університет, 2017. – 80 с.
4. <http://openmopac.net/home.html>
5. [https://en.wikipedia.org/wiki/Density\\_functional\\_theory](https://en.wikipedia.org/wiki/Density_functional_theory)
6. Nicolaou K.C., Montagnon T. Molecules that Changed the World. – Weinheim: Wiley-VCH Verlag GmbH & Co, 2008. – 385 p.
7. Jacob J. Microwave Assisted Reactions in Organic Chemistry: A Review // Internat. J. Chem. – 2012. – Vol. 4, No. 6. – P. 29–43.
8. Wu T.Y., Guo N., Teh C.Y., Hay J.X.W. Advances in Ultrasound Technology of Ultrasound Remediation. Chapter 2. Theory and Fundamentals of Ultrasound. – Springer, 2013, P. 5–12.
9. Ince N.H., Tezcanli G., Belen R.K., Apikyan I.G. Ultrasound as a catalyzer of aqueous reaction systems: the state of the art and environmental applications // Appl. Cat. B: Environmental. – 2001. – Vol. 29. – P. 167–176.

## 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.aist.go.jp/aist_e/list/database/riodb/)  
<http://www.ccdc.cam.ac.uk/>  
<https://organicchemistrydata.org/>