

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
Волинський національний університет імені Лесі Українки
Факультет хімії, екології та фармації
Кафедра органічної хімії та фармації

СИЛАБУС

нормативної навчальної дисципліни

Хімія теоретична та молекулярне моделювання

(назва дисципліни)

підготовки магістра

(назва освітнього рівня)

спеціальності 102 «Хімія»

(шифр і назва спеціальності)

освітньо-професійної програми

Хімія

(назва освітньо-професійної освітньо-наукової/освітньо-творчої програм)

Силабус навчальної дисципліни «Хімія теоретична і молекулярне моделювання» підготовки магістра, галузі знань 10 «Природничі науки», спеціальності 102 «Хімія», за освітньою програмою Хімія.

Розробник: : к.х.н. Салієва Л.М.

Силабус навчальної дисципліни затверджено на засіданні кафедри органічної хімії та фармації

протокол № 4 від 9 жовтня 2020 р.

Завідувач кафедри:



Сливка Н.Ю.

© Салієва Л.М., 2020 р.

I. Опис навчальної дисципліни

Найменування показників	Галузь знань, спеціальність, освітньо-професійна /освітньо-наукова/ освітньо-творча програма, освітній рівень	Характеристика навчальної дисципліни
Денна форма навчання	10 «Природничі науки», 102 «Хімія», Хімія, магістр	Нормативна
Кількість годин/кредитів 150/5		Рік навчання 1-й
		Семестр 1-й
		Лекції 20 год
		Практичні 16 год Лабораторні 18 год
ІНДЗ: немає		Самостійна робота 86 год
		Консультації 10 год
		Форма контролю: екзамен
Мова навчання		українська

II. Інформація про викладача

Салієва Леся Миколаївна

Науковий ступінь кандидат хімічних наук

Вчене звання -

Посада старший викладач

Контактна інформація 0954886559, saliieva.lesia@eenu.edu.ua

Дні занять <http://194.44.187.20/cgi-bin/timetable.cgi?n=700>

III. Опис дисципліни

1. Анотація курсу. Упровадження нових інформаційних технологій в освітній процес, підвищення рівня комп'ютерної (інформаційної) підготовки учасників освітнього процесу є для України нагальною потребою часу. Дисципліна «Хімія теоретична і молекулярне моделювання» орієнтована на ознайомлення з сучасними методами моделювання, програмним забезпеченням для моделювання в хімії та набуття навиків його застосування.

2. Пререквізити: неорганічна хімія, органічна хімія, фізична хімія, аналітична хімія, квантова хімія, інформаційні технології в професійній діяльності, статистичні та хемометричні методи в хімії.

Постреквізити: новітні методи органічного синтезу, сучасні методи інструментального аналізу.

3. Метою викладання навчальної дисципліни є ознайомлення студентів з фундаментальними принципами моделювання, окремими програмними засобами для моделювання хімічних структур і процесів та набуття навиків роботи з ними.

Завдання навчальної дисципліни:

- навчити студентів використовувати основні поняття хімії, основні закони, теорію будови атома, загальні відомості про хімічні елементи, теорії хімічних зв'язків, вчення про розчини, та загальні закономірності протікання хімічних реакцій для моделювання хімічних процесів і структур;
- засвоїти базові принципи моделювання фізико-хімічних процесів;
- засвоїти окремі програмні засоби для моделювання шкільного хімічного експерименту;
- засвоїти базові принципи молекулярного моделювання;
- засвоїти окремі програмні засоби для молекулярного моделювання;

4. Процес вивчення дисципліни спрямований на формування елементів інтегральних (ІК), загальних (ЗК) та фахових компетентностей (ФК):

- **ІК:** Здатність розв'язувати складні задачі і проблеми у галузі хімії або у процесі навчання, що передбачає проведення досліджень та/або здійснення інновацій та характеризується невизначеністю умов і вимог.
- **ЗК 2:** Здатність вчитися і оволодівати сучасними знаннями.
- **ЗК 3:** Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу.
- **ЗК 4:** Здатність застосовувати знання у практичних ситуаціях.
- **ЗК 7:** Здатність використовувати інформаційні та комунікаційні технології

- **ЗК 8:** Здатність оцінювати та забезпечувати якість виконуваних робіт.
- **ЗК 14:** Здатність до пошуку, критичного аналізу та обробки інформації з різних джерел.
- **ФК 1:** Здатність використовувати закони, теорії та концепції хімії у поєднанні із відповідними математичними інструментами для опису природних явищ.
- **ФК 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.
- **ФК 4:** Здатність інтерпретувати, об'єктивно оцінювати і презентувати результати свого дослідження.
- **ФК 5:** Здатність застосовувати методи комп'ютерного моделювання для вирішення наукових, хіміко-технологічних проблем та проблем хімічного матеріалознавства.
- **ФК 6:** Здатність здобувати нові знання в галузі хімії та інтегрувати їх із уже наявними.
- **ФК 8:** Здатність формулювати нові гіпотези та наукові задачі в галузі хімії, вибирати напрями та відповідні методи для їх розв'язання на основі розуміння сучасної проблематики досліджень в галузі хімії та беручи до уваги наявні ресурси.

5. Структура навчальної дисципліни

Назви змістовних модулів і тем	Усього	Лек.	Лабор.	Практ.	Конс.	Сам. роб.	Форма контролю/ Бали
Змістовний модуль 1. Хімічні структури та їх моделювання.							
Тема 1. Теорія хімічної будови. Хімічний зв'язок.	7	2	-	-	-	5	-
Тема 2. Моделювання хімічних структур.	14	2	4	-	1	7	РЗ/6
Тема 3. ЯМР спектроскопія та моделювання ЯМР ^1H - та ^{13}C -спектрів.	14	2	-	4	1	7	РЗ/4

Разом за модулем 1.	35	6	4	4	2	19	КР/15
Змістовний модуль 2. Основні фізико-хімічні процеси та їх моделювання.							
Тема 4. Основні поняття та методи сучасної аналітичної хімії.	5	-	-	-	-	5	-
Тема 5. Хімічна рівновага у гомогенних та гетерогенних системах.	5	-	-	-	-	5	-
Тема 6. Гравіметричний аналіз.	8	2	-	-	1	5	-
Тема 7. Титриметричний аналіз.	8	2	-	-	1	5	-
Тема 8. Моделювання фізико-хімічних процесів.	26	2	8	4	2	10	РЗ/10
Разом за модулем 2.	52	6	8	4	4	30	КР/15
Змістовний модуль 3. Основи квантової хімії та методи оптимізації геометрії молекул.							
Тема 9. Основні поняття квантової хімії.	6	1	-	-	-	5	-
Тема 10. Основні положення методу МО як лінійної комбінації АО.	6	1	-	-	-	5	-
Тема 11. Програмний комплекс HyperChem.	13	1	4	-	1	7	РЗ/6
Тема 12. Методи оптимізації геометрії молекул.	13	1	-	4	1	7	РЗ/4
Разом за модулем 3.	38	4	4	4	2	24	КР/15
Змістовний модуль 4. Біологічна активність гетероциклічних сполук та способи її прогнозування.							
Тема 13. Біологічна активність гетероциклічних сполук.	9	2	-	-	1	6	-
Тема 14. Прогнозування біологічної активності хімічних сполук.	16	2	2	4	1	7	РЗ/10
Разом за модулем 4.	25	4	2	4	2	13	КР/15
Всього годин/Балів	150	20	18	16	10	86	100

*Форма контролю: ДС – дискусія, ДБ – дебати, Т – тести, ТР – тренінг, РЗ/К – розв’язування задач / кейсів, ІНДЗ / ІРС – індивідуальне завдання / індивідуальна робота студента, РМГ – робота в малих групах, МКР / КР – модульна контрольна робота/ контрольна робота, Р – реферат, а також аналітична записка, аналітичне есе, аналіз твору тощо.

6. Завдання для самостійного опрацювання.

Питання, що виносяться на самостійне опрацювання:

Тема 1. Теорія хімічної будови. Хімічний зв'язок.	Основні типи хімічних зв'язків та їх характеристики.
Тема 2. Моделювання хімічних структур.	-
Тема 3. ЯМР спектроскопія та моделювання ЯМР ^1H - та ^{13}C -спектрів.	Основні методи встановлення структури органічних сполук.
Тема 4. Основні поняття та методи сучасної	Особливості, предмет та завдання сучасної

аналітичної хімії.	аналітичної хімії.
Тема 5. Хімічна рівновага у гомогенних та гетерогенних системах.	Хімічна рівновага у гомогенних та гетерогенних системах. Фактори, що впливають на неї.
Тема 6. Гравіметричний аналіз.	Основні поняття гравіметричного аналізу.
Тема 7. Титриметричний аналіз.	Основні поняття титриметричного аналізу.
Тема 8. Моделювання фізико-хімічних процесів.	-
Тема 9. Основні поняття квантової хімії.	Квантово-механічні принципи будови речовини.
Тема 10. Основні положення методу МО як лінійної комбінації АО.	Поняття про метод МО.
Тема 11. Програмний комплекс HyperChem.	-
Тема 12. Методи оптимізації геометрії молекул.	-
Тема 13. Біологічна активність гетероциклічних сполук.	-
Тема 14. Прогнозування біологічної активності хімічних сполук.	-

IV. Політика оцінювання

Політика викладача щодо студента: студент повинен відвідувати лекції та лабораторні заняття. Пропущені без поважних причин заняття потрібно відпрацювати: підготувати конспект лекції, виконати лабораторну роботу, пройти опитування по темі.

Політика щодо академічної доброчесності: усі завдання студент повинен виконувати самостійно.

Політика щодо дедлайнів та перескладання: у випадку пропуску лекції без поважної причини студент готує конспект до наступного лабораторного заняття. До закінчення вивчення модуля студент повинен відпрацювати усі лабораторні заняття.

V. Підсумковий контроль

Іспит студенти складають в усній формі.

На іспит виносяться наступні питання:

1. Теорія хімічної будови. Валентність. Природа хімічного зв'язку.
2. Ковалентний зв'язок. Характеристики ковалентного зв'язку.
3. Механізм утворення ковалентного зв'язку. Метод валентних зв'язків. Гібридизація атомних орбіталей.

4. Іонний зв'язок. Характеристики іонного зв'язку.
5. Металічний зв'язок. Дальнодіючий хімічний зв'язок.
6. Водневий зв'язок. Міжмолекулярна взаємодія.
7. Представлення хімічних структур. 1-D рівень представлення хімічних структур. Лінійні нотації (Lineal Notation). Нотації SMILES: основні принципи побудови, переваги та недоліки застосування.
8. Представлення і візуалізація хімічних структур на 2-D рівні.
9. Графічні редактори хімічних формул ChemSketch, MarvinSketch, ChemDraw. Особливості інтерфейсу та структура меню програми ChemDraw.
10. Основні фізичні методи визначення будови органічних речовин.
11. Особливості, предмет та завдання сучасної аналітичної хімії. Методи аналізу. Методи аналітичної хімії.
12. Аналітичний сигнал, аналітичний процес. Якісний аналіз. Загальні положення. Дробний та систематичний методи аналізу. Класифікації катіонів.
13. Хімічні тест-методи аналізу. Тест-реагенти та способи вимірювання аналітичного сигналу.
14. Методи маскування, розділення та концентрування. Методи маскування. Розділення і концентрування.
15. Осадження і співосадження. Сорбція. Екстракція.
16. Хроматографічні методи розділення та аналізу.
17. Хімічна рівновага в гомогенних системах. Швидкість хімічних реакцій. Закон діючих мас. Константа рівноваги хімічної реакції.
18. Теорія електролітичної дисоціації. Ступінь дисоціації. Сильні та слабкі електроліти. Ступінь та константа дисоціації слабких електролітів.
19. Стан сильних електролітів у розчинах. Активність, коефіцієнт активності, іонна сила розчину. Дисоціація слабких електролітів.

20. Константа дисоціації. Дисоціація води. Іонний добуток води. Водневий показник.
21. Хімічні рівноваги в гетерогенних системах. Фактори, які впливають на розчинність речовин.
22. Гравіметричний аналіз. Розрахунки в гравіметричному аналізі. Вимоги до осаджувачів, осаджуваної та гравіметричної форм.
23. Чутливість та точність гравіметричного методу аналізу. Процес осадження та його роль в гравіметричному аналізі.
24. Забруднення осадів. Способи очищення осадів у гравіметрії.
25. Титриметричний аналіз. Вимоги до реакцій в титриметричному аналізі. Класифікація методів титриметричного аналізу. Способи титрування.
26. Об'ємно-аналітичні розрахунки. Способи стандартизації робочих розчинів у титриметрії.
27. Метод протолітичного (кисотно-основного) титрування. Константи кислотності та основності. Розрахунки рН розчинів протолітів.
28. Буферні розчини. Криві титрування. Кисотно-основні індикатори. Загальна характеристика. Вимоги до індикаторів. Помилки титрування. Неводне титрування.
29. Окисно-відновні реакції в титриметрії. Особливості перебігу red-ox реакцій. Чинники, які впливають на величину потенціалу. Застосування реакцій окиснення-відновлення.
30. Криві окисно-відновного титрування. Індикатори в red-ox методах титрування. Способи титрування.
31. Методи окисно-відновної титриметрії. Індикаторна помилка окисно-відновного титрування.
32. Спеціальне програмне забезпечення Model ChemLab. Загальна характеристика. Запуск програми та її налаштування. Меню програми. Вивчення інструментів. Основні команди та прийоми роботи у ChemLab.

- 33.Застосування ChemLab Eval для моделювання кислотно-основного титрування. Застосування ChemLab Eval для моделювання гравіметричного аналізу хлоридів.
- 34.Квантово-механічні принципи будови речовини: квантова механіка, корпускулярно-хвильовий дуалізм, принцип невизначеності, хвильова функція, рівняння Шредінгера. Квантові числа.
- 35.Енергії та конфігурації електронних орбіталей атома. Атомні орбіталі (АО).
- 36.Будова атома. Деякі характеристики атомів елементів: атомні радіуси, потенціали іонізації та спорідненість до електрона, електронегативність.
- 37.Поняття про метод МО (ЛКАО).
- 38.Програмний комплекс HyperChem. Розрахунки методами молекулярної механіки, напівемпіричними і неемпіричними методами квантової хімії.
- 39.Графічна побудова, редагування та зміна параметрів хімічних структур.
- 40.Лікарські сполуки на основі п'яти-, шести-, семичленних та конденсованих гетероциклів.
- 41.Теоретичні основи прогнозування біологічної активності. Комп'ютерна система PASS. Прогнозування токсичності сполук за допомогою програми GUSAR.

VI. Шкала оцінювання

Оцінка в балах за всі види навчальної діяльності	Оцінка
90 – 100	Відмінно
82 – 89	Дуже добре
75 - 81	Добре
67 -74	Задовільно
60 - 66	Достатньо
1 – 59	Незадовільно

VI. Рекомендована література та інтернет-ресурси

1. Жак О.В., Каличак Я.М. Загальна хімія. Навчальний посібник. – Львів: Видавничий центр ЛНУ імені Івана Франка, 2010. – 185 с.

2. Романова Н.В. Загальна і неорганічна хімія. – К.: Вища школа, 1988. – 432 с.
3. Черних В.П., Гриценко І.С, Єлисеєва Н.М. Органічна хімія. – Харків: НФаУ «Оригінал», 2004. – 464 с.
4. Ракша О.В. Інформаційні технології у фізичній хімії: навчально-методичний посібник. – Донецьк: ДонНУ, 2013. – 98 с.
5. Воловенко Ю.М., Туров О.В. Ядерний магнітний резонанс: підруч. для вищ. навч. закл.. – К.: Ірпінь; ВТФ «Перун», 2007. – 480 с.
6. Циганок Л.П. Аналітична хімія. Хімічні методи аналізу: навчальний посібник / Л.П.Циганок, Т.О.Бубель, А.Б.Вишнікін, О.Ю.Вашкевич; За ред. проф. Л.П.Циганок - Дніпропетровськ: ДНУ ім. О.Гончара, 2014. – 252 с.
7. Янченко В.О., Смольський О.С., Демченко А.М. Основи хімії гетероциклічних сполук: навч. посіб. – Чернігів: Чернігівський національний педагогічний університет ім. Т.Г. Шевченка, 2010. – 224 с
8. Губський Ю.І. Біологічна хімія: підручник. – К.: Нова книга, 2007. – 656 с
9. Бондар О.С. Прогнозування біологічної активності сполук з застосуванням комп'ютерних програм. Навчальний посібник / О.С. Бондар Чернігів: НУЧК ім. Т.Г. Шевченка, 2018. – 64 с.
10. <http://www.cambridgesoft.com>
11. <http://www.way2drug.com/gusar/>