

Анотація навчальної дисципліни «Фізико-хімічні методи доведення будови молекул»

Анотація. Дисципліна «Фізико-хімічні методи доведення будови молекул» належить до переліку обов'язкових навчальних дисциплін, що пропонуються в рамках циклу професійної підготовки аспірантів зі спеціальності хімія на першому році навчання. Вона забезпечує професійний розвиток аспіранта та спрямована на отримання поглиблених знань з методів дослідження взаємозв'язку хімічної будови молекул з їхньою електронною структурою та фізико-хімічними властивостями; такі методи необхідні для подальшої успішної самостійної дослідницької роботи.

Кількість кредитів: 4

Викладач: Качковський Олексій Дмитрович, д. х. н., старший науковий Інституту біоорганічної хімії та нафтохімії НАН України.

Мова викладання: українська.

Місце у структурно-логічній схемі: ОНД 2.03 читається на другому році навчання.

Термін вивчення: дисципліна вивчається на першому році навчання за освітньо-науковим рівнем «доктор філософії» в обсязі 120 годин, у тому числі 60 години аудиторних занять (10 год. – лекційні заняття, 50 годин – практичні заняття), 60 годин самостійної роботи.

Мета навчальної дисципліни – сформувати у аспірантів цілісне уявлення про взаємозв'язок між хімічною будовою молекул та їхніми електронними та фізико-хімічними властивостями, такими як просторова будова можливих конформацій, довжини зв'язків у молекулі, розподіл зарядів на атомах, розташування і форма молекулярних орбіталей, природа електронних переходів і спектральні властивості. Важливим є завдання навчитись проводити практичні дослідження залежності електронних властивостей молекул від їх хімічної будови, освоїти новітні методи дослідження.

Важливою загальною метою курсу є підготовка аспірантів як ефективних дослідників і викладачів вищої школи, здатних аналізувати спеціальну літературу, що стосується встановлення взаємозв'язку між будовою та властивостями молекул, стежити за тенденціями в розробці нових методів та застосовувати отриману інформацію для розв'язання практичних задач.

Змістовні модулі дисципліни:

- ❖ Квантово-хімічні методи розрахунків електронної будови молекул;
- ❖ Методи рентгено-структурного аналізу структурної будови;
- ❖ Метод ядерно-магнітного резонансу і атомні заряди;
- ❖ Спектральні методи.

У результаті вивчення курсу аспірант повинен:

Знати: методи дослідження фізико-хімічних досліджень; як застосувати набуті знання у практичних ситуаціях; як проводити пошук, обробляти та аналізувати інформацію з різних джерел; як вибирати та використовувати наукове обладнання, новітні інформаційні і комунікаційні технології та процедури, які відносяться до хімічних та фізико-хімічних методів досліджень; як критично оцінювати дані проведених експериментів, в тому числі із застосуванням обчислювальної техніки, як інтерпретувати результати експериментів та брати участь у дискусіях стосовно наукового та практичного значення отриманих результатів.

Вміти: застосовувати інформаційних технології та відповідне програмне забезпечення для здійснення наукових досліджень та інтерпретації їх результатів; опанувати новітніми фізико-хімічними методами досліджень властивостей речовин та будови їх молекул; навчитись вибирати та використовувати наукове обладнання, новітні інформаційні і комунікаційні технології та процедури, які відносяться до хімічних та фізико-хімічних методів досліджень; бути здатним надійно встановлювати молекулярну структуру та ідентифікувати синтезовані сполуки.