

**НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ  
ІНСТИТУТ БІООРГАНІЧНОЇ ХІМІЇ ТА НАФТОХІМІЇ**

**ЗАТВЕРДЖЕНО**

Вченою радою

Інституту біоорганічної хімії та  
нафтохімії НАН України

протокол № 8

від « 26 » 09 2017 року

Голова Вченої ради

Інституту біоорганічної хімії та  
нафтохімії НАН України

чл.-кор. НАН України



*A.I. Vovk*  
А.І. Вовк

**ПРОГРАМА**

**навчальної дисципліни**

**«ФІЗИКО-ХІМІЧНІ МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ**

**СТРУКТУРИ МОЛЕКУЛ»**

<b>ГАЛУЗЬ ЗНАНЬ</b>	<b>10 – ПРИРОДНИЧІ НАУКИ</b>
<b>СПЕЦІАЛЬНІСТЬ</b>	<b>102 – ХІМІЯ</b>
<b>СПЕЦІАЛІЗАЦІЯ</b>	<b>БІООРГАНІЧНА ХІМІЯ, НАФТОХІМІЯ ТА ВУГЛЕХІМІЯ</b>
<b>РІВЕНЬ ОСВІТИ</b>	<b>ТРЕТІЙ (ОСВІТНЬО-НАУКОВИЙ)</b>

**Київ -2017 р.**

РОЗРОБНИК ПРОГРАМИ:

Старший науковий співробітник ІБОНХ НАН України, доктор хімічних наук **Качковський О. Д.**



\_\_\_\_\_  
(підпис)

Програму затверджено на засіданні Вченої ради  
Інституту біоорганічної хімії та нафтохімії НАН України  
протокол № 8  
від « 26 » 09 2017 року

Вчений секретар



\_\_\_\_\_  
Попільніченко С.В.

## ВСТУП

Програму обов'язкової навчальної дисципліни «**Фізико-хімічні методи дослідження структури молекул**» складено відповідно до освітньо-професійної програми підготовки «**доктор філософії**» в галузі природничих наук спеціальності **102 – «Хімія»**.

**Предметом** вивчення навчальної дисципліни є фізико-хімічні методи дослідження структури молекул, використання оптичних та електрохімічних методів для формування цілісного уявлення про взаємозв'язок між хімічною будовою молекул та їхніми електронними та фізико-хімічними властивостями.

**Міждисциплінарні зв'язки:** Навчальна дисципліна «**Фізико-хімічні методи дослідження структури молекул**» згідно з навчальним планом належить до циклу дисциплін професійної підготовки, яка викладається на 2 курсі аспірантури.

Базою для вивчення дисципліни «Фізико-хімічні методи дослідження структури молекул» є курси «Органічна хімія», «Колоїдна хімія», «Біоорганічна хімія», «Будова речовини», «Фізичні методи дослідження», які вивчаються при підготовці більшості напрямів підготовки бакалавра, спеціаліста та магістра спеціальності «Хімія». Курс «Фізико-хімічні методи дослідження структури молекул», в свою чергу, є основою для більш поглиблених курсів, таких як, «Біоактивні елементорганічні сполуки», «Основи хімії природних сполук», «Молекулярні механізми в біоорганічній хімії» та «Новітні методи органічного синтезу біоактивних сполук».

Матеріал курсу слугує теоретичною основою для формування умінь та навичок, необхідних для ефективною дослідницької роботи, формування цілісного уявлення про взаємозв'язок між хімічною будовою молекул та їхніми електронними та фізико-хімічними властивостями, аналізу прикладних аспектів в галузі біоорганічної хімії з застосуванням теоретичних основ для розв'язання практичних задач.

# 1. МЕТА ТА ЗАВДАННЯ НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

## 1.1. Мета навчальної дисципліни:

- формування базових знань про сучасні методи дослідження хімічної будови різних типів органічних сполук, освоєння їх практичного застосування.

## 1.2. Основні завдання навчальної дисципліни:

Формування цілісного уявлення про взаємозв'язок між хімічною будовою молекул та їхніми електронними та фізико-хімічними властивостями. Важливим є завдання навчитись проводити практичні дослідження залежності електронних властивостей молекул від їх хімічної будови, освоїти новітні методи дослідження.

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.

Сприяння розширенню професійного світогляду, підвищення загальної освіченості та культури фахівця зі спеціальності 102 – «Хімія».

Згідно з вимогами освітньо-професійної програми студенти після засвоєння навчальної дисципліни мають продемонструвати такі результати навчання:

### ***Знати:***

- Сучасний стан методів фізико-хімічних досліджень будови органічних молекул, предмет, класифікацію методів і специфіку їх застосування.
- Квантово-хімічні методи розрахунків молекулярної геометрії та електронної структури органічних молекул. Напів-емпіричні та не-

емпіричні методи. Молекулярні орбіталі, оцінка донорних та акцепторних властивостей молекул.

- Стереохімічні особливості будови насичених і спряжених органічних сполук. Конформаційний аналіз.
- Метод рентгено-структурного аналізу; кристали, елементарні комірки, далекий порядок в кристалах, надмолекулярні композити; застосування РСА для дослідження біологічно активних молекул.
- Метод ядерного магнітного резонансу; хімічні зсуви, спин-спінова взаємодія, одномірні методики ЯМР, двохвимірні спекри. Інтерпретація спектрів ЯМР та кореляція хімізсувів з розподілом електронної густини в молекулах.
- Особливості будови спряжених молекул, гетеро ароматичних сполук, в тому числі – природних. Специфіка застосування методів ЯМР для встановлення атомних зарядів у спряжених системах.
- Класифікація спектральних методів: спектри поглинання, флуоресценції, фото-електронні методи вимірювання потенціалів іонізації, часово-роздільні методи із застосування імпульсних лазерів. Лінійні та нелінійно оптичні методи.
- Особливості спектрів спряжених молекул. Зв'язок молекулярних рівнів з потенціалами іонізації та спорідненістю до електрона.
- Класифікацію, структурні особливості та хімічні властивості природних та синтетичних барвників.

***Вміти:***

- Проводити квантово-хімічні розрахунки різних типів органічних молекул в основу та збудженому станах, моделювати хімічні перетворення, моделювати взаємодію молекул – потенційних фармакофорів з біологічними полімерами.
- Встановлювати кореляції розрахованих характеристик молекул з експериментальними даними: оптимізовану молекулярну геометрію

з даними РСА; розраховані заряди на атомах з даними ЯМР спектрів.

- Розраховувати конформаційні перетворення молекул, встановлювати особливості конформацій за допомогою квантово-хімічних розрахунків та спектральних методів.
- Орієнтуватися в сучасних методах розрахунків, вміти користуватися пакетами програм; вміти встановлювати надійні кореляції розрахованих даних з результатами експериментальних досліджень.
- Оцінювати взаємозв'язок між будовою та властивостями органічних молекул, вміти прогнозувати властивості нових сполук за їх хімічною будовою.
- Самостійно працювати з учбовою, довідковою та науковою хімічною літературою, проводити літературний пошук в області фізико-хімічних досліджень органічних сполук, робити узагальнюючі висновки.
- Ставити навчально-дослідні експерименти на основі оволодіння основними прийомами проведення квантово-хімічного моделювання та вимірювання експериментальних характеристик органічних сполук., складати звіт по роботі та оформляти наукові статті, користуватись довідковими матеріалами.
- Застосовувати одержані теоретичні знання та практичні навички в подальшій професійній діяльності.

***Мати навички:***

- Проведення квантово-хімічних розрахунків, встановлення кореляцій з даними рентгенівських та спектральних експериментів і спостережень, висунування гіпотез та встановлення меж їх застосування.
- Прогнозування біологічної активності різних класів фармакофорів.

- Практичного застосування отриманих теоретичних знань з квантової хімії, кореляції з експериментальними результатами фізичних досліджень органічних сполук для розробки нових біологічно активних молекул.

В рамках даної дисципліни поглиблюються і розвиваються такі компетенції:

❖ ***Універсальні компетенції:***

здатність проектувати і здійснювати комплексні дослідження, в тому числі міждисциплінарні, на основі цілісного системного наукового світогляду з використанням знань в області історії і філософії науки;

❖ ***Загальнопрофесійні компетенції:***

здатність самостійно здійснювати науково-дослідницьку діяльність в біоорганічній хімії з використанням сучасних методів дослідження та інформаційно-комунікаційних технологій.

❖ ***Професійні компетенції:***

здатність організувати проведення квантово-хімічних розрахунків та спектральних досліджень, проводити їх обробку, аналізувати їх результати та узагальнювати у вигляді наукових статей для провідних профільних журналів; готовність до розробки навчально-методичної документації для проведення навчального процесу.

## 2. СТРУКТУРА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

На вивчення навчальної дисципліни відводиться 120 годин/4 кредита ECTS.

Модулі дисципліни і види занять.

№	Модулі дисципліни	Кількість кредитів ЄКТС	Обсяг навчальної роботи (в годинах)						Вид підсумкового контролю
			загальний обсяг	всього аудиторних	лекції	практичні	семінари	Самостійна робота	
1.	Вступ. Методи дослідження будови органічних молекул	4	120	60	10	50	-	60	
	<b>Разом</b>	<b>4</b>	<b>120</b>	<b>60</b>	<b>10</b>	<b>50</b>	<b>-</b>	<b>60</b>	<b>Залік</b>

Навчальна дисципліна містить один кредитний модуль:

### **МОДУЛЬ 1. ВСТУП. МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ БУДОВИ ОРГАНІЧНИХ МОЛЕКУЛ.**

**Тема 1.** Вступ. Методи дослідження будови органічних молекул.

Фізико-хімічні методи встановлення будови органічних молекул. Класифікація. Прилади і вимірювання характеристик.

**Тема 2.** Квантово-хімічні методи.

Рівняння Шредингера, ступені наближення: не-емпіричні, напів-емпіричні та не-емпіричні методи розрахунків. Розрахунки оптимізованою молекулярної геометрії та розподілу електронної густини (зарядів на атомах). Особливості спряжених молекул. Розрахунки характеристик в основному та збудженому станах. Радикали як системи з відкритою електронною оболонкою. Спінова густина. Індокси реакційної здатності. Відносне розташування рівнів та донорно-акцепторні властивості.

**Тема 3.** Метод рентгено-структурного аналізу (РСА).

Кристали, елементарні комірки, далекий порядок в кристалах, надмолекулярні композити, молекулярні агрегати. Конформаційний аналіз. Кореляції розрахованої молекулярної геометрії з даними РСА. Застосування РСА для дослідження біологічно активних молекул.



#### **Тема 4.** Метод ядерного магнітного резонансу.

Хімічні зсуви, спин-спінова взаємодія, одномірні методики ЯМР, двохвимірні спектри. Інтерпретація спектрів ЯМР та кореляція хімізсувів з розподілом електронної густини в молекулах.

Особливості будови спряжених молекул, гетеро ароматичних сполук, в тому числі – природних. Специфіка застосування методів ЯМР для встановлення атомних зарядів у спряжених системах.

#### **Тема 5.** Спектральні методи.

Класифікація спектральних методів: спектри поглинання, флуоресценції, збудження та анізотропії збудження флуоресценції, фотоелектронні методи вимірювання потенціалів іонізації, часово-роздільні методи із застосування імпульсних лазерів. Лінійні та нелінійно оптичні методи. Кореляція розрахованих енергетичних характеристик з експериментальними спектральними даними.

### **3. РЕКОМЕНДОВАНА ЛІТЕРАТУРА**

#### **Базова:**

1. Ю.А.Жданов. Теория строения органических соединений. Москва.Мир. «Высшая школа» 1971, 282 с.
2. Дьюар М., Теория молекулярных орбиталей в органической химии. М. Мир, 1972. 450 с.
3. Воловенко Ю.М., Туров О.В. Ядерный Магнитный резонанс. Київ. ВТФ «Перун», 2007. 480 с.
4. Valeur B.Molecular fluorescence. Willey-VCH. E-Book, 2001.500 p.

### **4.ФОРМА ПІДСУМКОВОГО КОНТРОЛЮ УСПІШНОСТІ**

**НАВЧАННЯ:** Залік.

## **5. ЗАСОБИ ДІАГНОСТИКИ УСПІШНОСТІ НАВЧАННЯ:**

Діагностика успішності навчання аспірантів під час проведення лекційних занять:

усне опитування, участь в дискусії, виконання практичних вправ.

Діагностика успішності навчання аспірантів під час проведення практичних та індивідуальних занять:

- усне опитування;
- участь в обговоренні дискусійних питань за лекційним та практичним матеріалом.