

# ПРОГРАМА ВСТУПНИХ ВИПРОБУВАНЬ З ХЕМОІНФОРМАТИКИ ПРИ ВСТУПІ НА НАВЧАННЯ ЗА ОСВІТНІМ СТУПЕНЕМ МАГІСТРА

## Інститут високих технологій

- Будова атома та періодичний закон. Головні характеристики елементів: енергія іонізації, спорідненість до електрону, електронегативність, атомний та йонні радіуси.
- Основні типи хімічного зв'язку та їх характеристики.
- Метод валентних зав'язків та молекулярних орбіталей для опису ковалентного зв'язку.
- Ентальпія та тепловий ефект хімічної реакції. Закон Гесса.
- Енергія Гіббса. Критерії самочинного перебігу процесів
- Хімічна рівновага та умови її зміщення Принцип Ле-Шател'є. Константа хімічної рівноваги.
- Поняття про механізми хімічних реакцій. Кінетичний та термодинамічний контроль.
- Швидкість хімічної реакції. Закон діючих мас. Константа швидкості хімічної реакції та її залежність від температури. Енергія активації.
- Поняття про каталіз. Гомо- та гетерогенний каталіз
- Окисно-відновні реакції. Стандартний електродний потенціал.
- Теорії кислот та основ (Бренстеда, Льюїса). Кислотно-основні рівноваги в розчинах та константи іонізації.
- Основні класи неорганічних сполук: оксиди, кислоти, основи, амфотерні гідроксиди, солі, координаційні сполуки. Хімічний зв'язок в координаційних сполуках
- Розрахунки за хімічними рівняннями: кількість речовини, закон стехіометричних відношень.
- Хімія неметалів та перехідних елементів: водню, галогенів, благородних газів, халькогенів,
- елементів підгрупи нітрогену та карбону.
- Загальні властивості елементів-металів та їх сполук.
- Будова органічних сполук. Типи гібридизації атомів карбону та структура органічних сполук. Явище ароматичності. Мезомерний та індуктивний ефект, гіперкон'югація.
- Ізомерія органічних сполук. Stereoізомерія. Поняття про хіральність.
- Нейтральні, заряджені органічні сполуки, карбокатиони та карбаніони, вільні радикали, карбени.
- Вуглеводні (алкани, алкени, алкіни, циклічні вуглеводні, ароматичні вуглеводні)
- Функціоналізовані органічні сполуки - галогенпохідні вуглеводнів, спирти, феноли, аміни, нітросполуки
- Карбонільні сполуки, карбонові кислоти та їх похідні

- Основні природні сполуки: вуглеводи, ліпіди, амінокислоти, білки, нуклеїнові кислоти
- Загальний огляд механізмів реакцій в органічній хімії. Реакції нуклеофільного, електрофільного та радикального заміщення. Реакції приєднання. Реакції окислення та відновлення. Електроциклічні реакції
- Програмне забезпечення для створення і форматування складних наукових текстів (MS Word, OpenWrite, LaTeX та ін).
- Програмне забезпечення для аналізу та візуалізації даних (MS Excel, OpenCalc, Origin та ін.)
- Програмне забезпечення для статистичного аналізу наукових даних (Statistica, R та інші.)
- Програмне забезпечення для створення і візуалізації молекулярних структур (ChemOffice, DS Visualizer та ін.).
- Банки даних наукових публікацій з хімічного, медичного і біологічного спрямування (NCBI PubMed) та особливості роботи з цими бібліотеками.
- Банки даних послідовностей біополімерів (NCBI Genbank, UniProt та ін.), засоби пошуку, співставлення та аналізу даних, реалізовані в цих банках.
- Банки даних органічних сполук (NCBI PubChem, Zinc, CCDC та інші), засоби пошуку, співставлення та аналізу даних, реалізовані в цих банках.
- Банки даних просторової структури макромолекул (PDB, NDB, Proteopedia та інші).