

ТЕМИ КУРСОВИХ РОБІТ

з дисципліни

«Моделювання хіміко-технологічних процесів і комп'ютерна хімія».

| Прізвище студента | Тема |
|-----------------------|---|
| ХД-21мп | |
| Андрух Юлія | Дослідження бар'єру обертання метильної групи бутену-2 з побудовою структури у внутрішній системі координат |
| Бортник Денис | Дослідження електрофільного приєднання броду до етилену з побудовою структури у внутрішній системі координат |
| Будаговська Єлизавета | Дослідження взаємодії CH_3 радикалу з метаном через D_{3d} симетричний перехідний стан з побудовою структури у внутрішній системі координат |
| Височин Данііл | Дослідження гідридного зсуву в етил-катіоні з побудовою структури у внутрішній системі координат |
| Віннічук Катерина | Розкриття оксирану ціанід аніоном з побудовою структури у внутрішній системі координат |
| Гавриленко Валерія | Дослідження протонування циклопропану з побудовою структури у внутрішній системі координат |
| Глухова Поліна | Дослідження бар'єру інверсії N-метилазиридину з побудовою структури у внутрішній системі координат |
| Іщенко Марина | Дослідження бар'єру інверсії азетидину з побудовою структури у внутрішній системі координат |
| Кравченко Фаїна | Дослідження протонування азиридину з побудовою структури у внутрішній системі координат |
| Крюкова Єлизавета | Дослідження перепротонування мурашиної кислоти з побудовою структури у внутрішній системі координат |
| Куніцький Антон | Дослідження приєднання HC1 до ціановодню з побудовою структури у внутрішній системі координат |
| Луценко Тетяна | Дослідження перепротонування формаміду через 4-х центровий перехідний стан з побудовою структури у внутрішній системі координат |
| Малихіна Юліана | Дослідження взаємодії Cl -радикалу з метаном з побудовою структури у внутрішній системі координат |
| Навозняк Катерина | Дослідження бар'єру інверсії N-флуороазиридину з побудовою структури у внутрішній системі координат |
| Рибак Анастасія | Дослідження циклопропіл-метильний карбокатиону з побудовою структури у внутрішній системі координат |
| Сікорська Карина | Дослідження C-C обертання бутадієну через C_2 -симетричний перехідний стан з побудовою структури у внутрішній системі координат |