

**КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ  
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА**

**Хімічний факультет**  
Кафедра органічної хімії



**«ЗАТВЕРДЖУЮ»**

Заступник декана  
з навчальної роботи  
**В.О. Павленко**

«квітень» 2018 року

**РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ**  
**КВАНТОВО-ХІМІЧНІ РОЗРАХУНКИ ОРГАНІЧНИХ СПОЛУК**

для здобувачів освітньо-наукового рівня  
доктор філософії

галузі знань **10 Природничі науки**  
спеціальність **102 Хімія**  
освітній рівень **третій (освітньо-науковий)**  
освітня програма **Хімія**  
вид дисципліни **вибіркова**

Форма навчання **денна**  
Навчальний рік **2018/2019**  
Період навчання **2 рік**  
Семестр **II**  
Кількість кредитів ECTS **4 кредити**  
Мова викладання, навчання та оцінювання **українська**  
Форма заключного контролю **іспит**

Викладач (лектор): **Пивоваренко Василь Георгійович**

Пролонговано: на **2019/2020** н.р.

 «05» 04 2019 р.


**КИЇВ – 2018**

**Розробник:**

Пивоваренко Василь Георгійович, д.х.н., проф., професор кафедри органічної хімії хімічного факультету Київського національного університету імені Тараса Шевченка

ЗАТВЕРДЖЕНО

Зав. кафедри органічної хімії

 (Хиля В.П.)

Протокол № 12 від "27" березня 2018 року

Схвалено науково - методичною комісією хімічного факультету

Протокол № 4 від "25" квітня 2018 року

Голова науково-методичної комісії  (Амірханов В.М.)

"25" квітня 2018 року

## ВСТУП

**1. Мета дисципліни** – теоретичне вивчення та практичне засвоєння методів розрахунку просторової будови та властивостей органічних сполук.

**2. Попередні вимоги до опанування навчальної дисципліни:**

1. Знати загальну, органічну, аналітичну та фізичну хімію на рівні магістра за спеціальністю «Хімія».
2. Володіти комп'ютером на рівні магістра за спеціальністю «Хімія».
3. Володіти навичками пошуку інформації в науковій літературі.
4. Володіти елементарними навичками продукування нових ідей, мати здатність до творчого (креативного) мислення

**3. Анотація навчальної дисципліни.** Курс «Квантово-хімічні розрахунки органічних сполук» призначений для вивчення аспірантами теоретичних основ та засвоєння практичних навичок у розрахунку просторової будови та властивостей органічних сполук. Розглядаються методи та бази квантово-хімічних розрахунків, розрахунки енергії конформацій та поверхонь потенціальної енергії конформаційних переходів, підходи та методи розрахунку конформаційної обмеженості та структурної жорсткості сполук, а також розрахунок кривих потенціальної енергії хімічних перетворень і підходи до розрахунку енергії електронно збуджених станів.

**4. Завдання:** подати сучасні підходи до розрахунку просторової будови та властивостей органічних сполук і закріпити їх при вирішенні практичних задач. На практиці ознайомити з сучасними програмами квантово-хімічних розрахунків. Подати сучасні підходи до розрахунку конформаційної обмеженості та структурної жорсткості сполук і закріпити їх при вирішенні практичних задач. Сформувати навички до розв'язку комплексних проблем у галузі професійної та/або дослідницько-інноваційної діяльності, що передбачає переосмислення наявних та створення нових цілісних знань та/або професійної практики; покращити здатність до пошуку, оброблення на аналізі інформації з різних джерел із використанням новітніх інформаційних і комунікаційних технологій та вміння проводити самостійні дослідження на сучасному рівні; сформувати здатність інтерпретувати дані, отримані в експериментах та вимірюваннях і аналізувати їх відповідність теорії; сприяти розвитку абстрактного мислення, здатності формувати робочі гіпотези та перевіряти їх на практиці із застосуванням інноваційних технологій хімії та суміжних дисциплін.

## 5. Результати навчання за дисципліною

<i>Код</i>	<i>Результат навчання (1. знати; 2. вміти; 3. комунікація*; 4. автономність та відповідальність*)</i>	<i>Форми викладання і навчання</i>	<i>Методи оцінювання (ПтК – поточний, ПсК – підсумковий контроль)</i>	<i>Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни</i>
1.1	Знати принципи і методи квантово-хімічних розрахунків будови органічних сполук	лекції, самостійні	ПтК-1-3, ПсК	15
1.2	Знати перелік характеристик органічних сполук, що розраховуються квантово-хімічними методами та шляхи їх розрахунку	лекції, самостійні, аналітична робота	ПтК-2, ПтК-3, ПсК	10
1.3	Знати принципи і методи квантово-хімічних розрахунків конформаційної обмеженості органічних сполук	лекції, самостійні, аналітична робота	ПтК-1, ПтК-3, ПсК	15
2.1	Вміти користуватись програмами квантово-хімічних розрахунків	лекції, практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПтК-3, ПсК	10
2.2	Вміти створювати 3D графічні зображення молекул та їх агрегатів	лекції, практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПтК-3, ПсК	15
2.3	Вміти виконувати практичні завдання, заплановані у програмі курсу	лекції, практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПтК-3, ПсК	15
3.1	Здатність використовувати сучасні інформаційно-комунікаційні технології при спілкуванні, а також для збору, аналізу, обробки та інтерпретації даних	лекції, практичні, самостійні, аналітична робота	ПтК-1, ПтК-2, ПтК-3, ПсК	5
3.2	Здатність виконувати передбачені навчальною програмою завдання та операції у співпраці з іншими виконавцями	лекції, практичні, самостійні, аналітична робота	ПтК-1, ПтК-3, ПсК	5
4.1	Вміти самостійно збирати та аналізувати інформацію в галузі комп'ютерної хімії	лекції, практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-3, ПсК	5
4.2	Вміти оперувати сучасною номенклатурою та термінологією в галузі комп'ютерної хімії	лекції, практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-3, ПсК	5

\* ПтК-1 - тест, ПтК-2 - опитування ПтК-3 – контрольна робота, ПсК - екзамен

\* заповнюється за необхідністю, наприклад для практик, лабораторних курсів тощо.

**6. В результаті вивчення дисципліни** аспірант отримає нові сучасні передові концептуальні та методологічні знання в галузі моделювання просторової будови та квантово-хімічних розрахунків властивостей органічних сполук, відпрацює вміння формулювати наукову проблему з огляду на сучасні наукові тенденції та здатність професійно презентувати результати своїх досліджень на міжнародних наукових конференціях.

Все це допоможе йому навчитись ініціювати, організовувати та проводити комплексні дослідження в галузі науково-дослідницької та інноваційної діяльності, пов'язаної із синтезом та встановленням будови органічних сполук, що приведе до отримання нових знань та покращення вміння кваліфіковано відображати результати наукових досліджень у наукових статтях в фахових виданнях, використовуючи при цьому сучасні інноваційні технології при плануванні експерименту, а також зборі, аналізі, обробці та інтерпретації експериментальних даних.

## 7. Схема формування оцінки

### 7.1. Форми оцінювання студентів:

#### - семестрове оцінювання

- 1.1. активність під час практичних занять;
- 1.2. виконання практичної роботи;
- 1.3. написання контрольної роботи

#### - підсумкове оцінювання

Іспит

(До іспиту входять теми, що вивчаються самостійно).

### 7.2. Організація оцінювання (за формами контролю згідно з графіком навчального процесу):

	<i>Змістовий модуль 1</i>		<i>Змістовий модуль 2</i>		<i>Іспит</i>	
	<i>Min. – 18 бали</i>	<i>Max. – 30 балів</i>	<i>Min. – 18 бали</i>	<i>Max. – 30 балів</i>	<i>Min – 24 бали</i>	<i>Max – 40 балів</i>
Усна відповідь	<b>3</b>	<b>5</b>	<b>3</b>	<b>5</b>		
Виконання практичної роботи	<b>8</b>	<b>15</b>	<b>8</b>	<b>15</b>		
Модульна контрольна робота	<b>7</b>	<b>10</b>	<b>7</b>	<b>10</b>	<b>24</b>	<b>40</b>

До іспиту може бути допущений аспірант, який виконав усі обов'язкові види робіт, які передбачаються навчальним планом з дисципліни "Квантово-хімічні розрахунки органічних сполук" (а саме: виконання зазначених у програмі самостійної роботи, написання модульних контрольних робіт, виконання практичних робіт), і при цьому за результатами модульно-рейтингового контролю в семестрі **отримав** за змістові модуля сумарну оцінку в балах не менше 36 балів (розрахунковий мінімум при формі підсумкового контролю – іспит).

Для отримання загальної позитивної оцінки з дисципліни оцінка за іспит **не може бути меншою 24 балів**.

У випадку відсутності аспіранта з поважних причин відпрацювання пропущених занять та перездачі контрольних робіт здійснюються у відповідності до до „Положення про порядок оцінювання знань студентів при кредитно-модульній системі організації навчального процесу” від 1 жовтня 2010 року.

### 7.3. Шкала відповідності оцінок

#### Шкала відповідності

<b>Відмінно</b> / Excellent	90-100
<b>Добре</b> / Good	75-89
<b>Задовільно</b> / Satisfactory	60-74
<b>Незадовільно</b> з можливістю повторного складання / Fail	35-59
<b>Незадовільно</b> з обов'язковим повторним вивченням дисципліни / Fail	0-34

## 8. Структура навчальної дисципліни

### ТЕМАТИЧНИЙ ПЛАН ЛЕКЦІЙ ТА СЕМІНАРСЬКИХ/ПРАКТИЧНИХ/ЛАБОРАТОРНИХ ЗАНЯТЬ

№ теми	Назва теми	Кількість годин		
		лекції	практ	С/Р
<b>Змістовий модуль 1.</b>				
<i>Теорія та принципи квантово-хімічних розрахунків</i>				
1	Принципи квантово-хімічних розрахунків просторової та електронної будови органічних молекул. Методи та базиси квантово-хімічних розрахунків.	2		10
2	Самостійна робота з інтернет-джерелами за темою лекції	-		10
3	Розрахунки енергії конформацій. Розрахунки поверхонь потенціальної енергії конформаційних переходів.	2		
	Самостійна робота з літературою за темою лекції			10
4	Підходи та методи розрахунку конформаційної обмеженості та структурної жорсткості сполук. Самостійна робота з літературою	2		10
5	Розрахунок кривих потенціальної енергії хімічних перетворень. Самостійна робота з літературою	2		10
7	Модульна контрольна робота 1	2		
<b>Змістовий модуль 2.</b>				
<i>Виконання практичних задач квантово-хімічних розрахунків</i>				
8	Виконання окремих операцій у середовищі програми хімічного моделювання "NureChem" та "MORAC".. Самостійна робота з літературою.	2	2	13
10	Розрахунок торсійних енергій молекули. Самостійна робота з літературою	2		13
11	Розрахунок заселеності конформаційних станів. Самостійна робота з літературою	2	2	10
15	Розрахунок активаційних бар'єрів хімічних процесів. Модульна контрольна робота 2	2		10
	<b>ВСЬОГО</b>	<b>18</b>	<b>4</b>	<b>96</b>

Загальний обсяг **120 год.**, в тому числі:

Лекцій – **18 год.**

Практичні заняття – **4 год.**

Консультації – **2 год** (проводяться протягом семестру).

Самостійна робота - **96 год.**

## Рекомендована література

### Основна:

1. Колендо О.Ю. Комп'ютерне моделювання органічних сполук і полімерів. Київ, ВПЦ «Київський університет», 2017, 80 с.
2. Jensen, Frank (2007). *Introduction to Computational Chemistry*. Chichester, England: John Wiley and Sons. pp. 80–81. ISBN 978-0-470-01187-4.
3. HyperChem for Windows/ New-York, Pergamon Press, 1992, 297 p.
4. [https://en.wikipedia.org/wiki/Molecular\\_modelling](https://en.wikipedia.org/wiki/Molecular_modelling) та список посилань у статті.
5. [https://en.wikipedia.org/wiki/Molecular\\_mechanics](https://en.wikipedia.org/wiki/Molecular_mechanics) та список посилань у статті.
6. [https://en.wikipedia.org/wiki/Semi-empirical\\_quantum\\_chemistry\\_method](https://en.wikipedia.org/wiki/Semi-empirical_quantum_chemistry_method) та список посилань у статті.
7. [https://en.wikipedia.org/wiki/Density\\_functional\\_theory](https://en.wikipedia.org/wiki/Density_functional_theory) та список посилань у статті.
8. [https://en.wikipedia.org/wiki/Ab\\_initio\\_quantum\\_chemistry\\_methods](https://en.wikipedia.org/wiki/Ab_initio_quantum_chemistry_methods) та список посилань у статті.

### Додаткова:

1. Levine, Ira N. (1991). *Quantum Chemistry*. Englewood Cliffs, New jersey: Prentice Hall. pp. 455–544. ISBN 978-0-205-12770-2.
2. Т. Кларк. Компьютерная химия. М., МИР, 1990, с. 385.
3. Ингольд К. Теоретические основы органической химии. М., "Мир", 1973.
4. Leach, Dr Andrew (2001-01-30). *Molecular Modelling: Principles and Applications* (2 ed.). Harlow: Prentice Hall. ISBN 9780582382107.
5. Friesner, Richard A. (2005-05-10). "Ab initio quantum chemistry: Methodology and applications". *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*. **102** (19): 6648–6653.
6. Cramer, Christopher J. (2002). *Essentials of Computational Chemistry*. Chichester: John Wiley & Sons, Ltd. pp. 232. ISBN 978-0-471-48552-0.

### **Інтернет ресурси**

1. [https://en.wikipedia.org/wiki/Molecular\\_modelling](https://en.wikipedia.org/wiki/Molecular_modelling) та список посилань у статті.
2. [https://en.wikipedia.org/wiki/Molecular\\_mechanics](https://en.wikipedia.org/wiki/Molecular_mechanics) та список посилань у статті.
3. [https://en.wikipedia.org/wiki/Semi-empirical\\_quantum\\_chemistry\\_method](https://en.wikipedia.org/wiki/Semi-empirical_quantum_chemistry_method) та список посилань у статті.
4. [https://en.wikipedia.org/wiki/Density\\_functional\\_theory](https://en.wikipedia.org/wiki/Density_functional_theory) та список посилань у статті.
5. [https://en.wikipedia.org/wiki/Ab\\_initio\\_quantum\\_chemistry\\_methods](https://en.wikipedia.org/wiki/Ab_initio_quantum_chemistry_methods) та список посилань у статті.