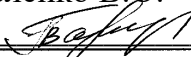


**КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА**

Хімічний факультет
Кафедра хімії високомолекулярних сполук

«ЗАТВЕРДЖУЮ»

Заступник декана/директора
з навчальної роботи
Павленко В.О.


« 27 » 06 2018 року



РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

**Комп'ютерне моделювання фізико-хімічної
поведінки органічних сполук та полімерів**

для здобувачів освітньо-наукового рівня
доктор філософії

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

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

Викладач (лектор): д.х.н., проф, **Колендо Олексій Юрійович**

Пролонговано: на **2019/2020** н.р.  (Завісено) « 05 » 04 2019 р.

КИЇВ – 2018

Розробники: **Колендо Олексій Юрійович, проф., д.х.н., проф., кафедра хімії високомолекулярних сполук**

Зав. кафедри хімії високомолекулярних сполук



(Савченко І.О.)

Протокол № 10 від 11 квітня 2018 р.

Схвалено науково - методичною комісією хімічного факультету

Протокол № 4 від «25» 04 2018 року

Голова науково-методичної комісії



(Амірханов В.М.)

«25» 04 2018 року

ВСТУП

1. Мета дисципліни – ознайомлення аспірантів з основними принципами квантово-хімічних розрахунків органічних сполук та полімерів, що проводяться в напівемпіричному наближенні на сучасних персональних комп'ютерах. На практичних заняттях закріплюються основні теоретичні положення, моделюються властивості органічних сполук і полімерів та вплив різних чинників на їх властивості.

2. Попередні вимоги до опанування навчальної дисципліни:

1. Знати загальну, органічну, полімерну, фізичну та фотохімію на рівні магістра за спеціальністю «Хімія».
2. Володіти навичками роботи на персональному комп'ютері 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 «Комп'ютерне моделювання фізико-хімічної поведінки органічних сполук та полімерів» належить до переліку дисциплін вільного вибору аспіранта. В даній дисципліні розглянуто приклади порівняння результатів експерименту в полімерній і органічній хімії та результати їх комп'ютерного моделювання. Розглянуто комп'ютерні програми, методи та базиси квантово-хімічних розрахунків необхідні для моделювання експерименту і спектральних даних. Наведено приклади користування цими програмами в кожному конкретному випадку.

4. Завдання: навчити аспірантів виконувати комп'ютерні обчислення, що мають відношення до хімічних проблем, використовуючи стандартне та спеціальне програмне забезпечення. Навчити аспірантів використовувати набуті знання та вміння для обробки експериментальних даних, аналізу проведених розрахунків, інтерпретації даних і відображення та моделювання хімічних систем та процесів. Навчити аспірантів використовувати свої знання та розуміння на практиці для вирішення задач та проблем хімії.

Згідно з вимогами Національної рамки кваліфікацій дев'ятого рівня освіти дисципліна забезпечує набуття аспірантами таких компетентностей:

інтегральна: Здатність розв'язувати комплексні проблеми в галузі професійної та/або дослідницько-інноваційної діяльності, що передбачає глибоке переосмислення наявних та створення нових цілісних знань та/або професійної практики.

загальні:

1. Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу (ЗК-1);
2. Навички використання новітніх інформаційних і комунікаційних технологій (ЗК-2);
3. Здатність проведення самостійних досліджень на сучасному рівні (ЗК-3);
4. Здатність генерувати нові ідеї (креативність) (ЗК-5);
5. Здатність застосовувати знання у практичних ситуаціях (ЗК-8)
6. Навички презентації наукових матеріалів та аргументів у письмовій та усній формі перед цільовою аудиторією (ЗК-11).

спеціальні (фахові, предметні):

1. Здатність формулювати наукову проблему, робочі гіпотези досліджуваної проблеми (ФК-1).
2. Здатність до критичного аналізу і оцінки сучасних наукових досягнень (ФК-2).
3. Здатність застосовувати знання та уміння при розв'язанні кількісних та якісних хімічних задач незнайомого типу (ФК-3).
4. Здатність демонструвати знання та розуміння важливих фактів, концепцій, принципів та теорій з хімії (ФК-4).

5. Здатність інтерпретувати дані, отримані при лабораторних експериментах та вимірюваннях і прив'язувати їх до відповідної теорії (ФК-5).
6. Здатність планувати, проектувати та виконувати наукові дослідження/проекти зі стадії постановки задачі до оцінювання і розгляду результатів та отриманих даних, що включає вміння вибрати потрібну техніку та процедури (ФК-7).
7. Здатність до опанування нових областей хімії шляхом самостійного навчання (ФК-8).
8. Навички використання сучасних комп'ютерних і комунікаційних методів в хімії. (ФК-13).
9. Навчальні навички, необхідні для подальшого професійного розвитку (ФК-14).

5. Результати навчання за дисципліною:

Код	Результат навчання (1. знати; 2. вміти; 3. комунікація*; 4. автономність та відповідальність*)	Форми викладання і навчання	Методи оцінювання (ПтК – поточний, ПсК – підсумковий контроль)	Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни
1. Знання				
1.	Основи прогнозування властивостей сполук та можливості використовувати набуті знання при проведенні наукових досліджень. Чіткі уявлення про основні методи розрахунків, які використовуються в хімії та межі їх застосування.	лекції, самостійні	ПтК-1-3, ПсК	10
2. Вміння				
2.	Вміння користуватись програмами квантово-хімічних розрахунків та правильного інтерпретування результатів розрахунків і співвіднесення їх з результатами експерименту.	Лекції, практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПтК-3, ПсК	40
3. Комунікація				
3.1	Здатність використовувати сучасні інформаційно-комунікаційні технології при спілкуванні, а також для збору, аналізу, обробки, інтерпретації результатів розрахунку	лекції, практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПтК-3, ПсК	20
3.2	Здатність виконувати передбачені навчальною програмою завдання та операції у співпраці з іншими виконавцями	Лекції, практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-3, ПсК	10
4. Автономність та відповідальність				
4.	Вміти самостійно фіксувати, та інтерпретувати результати розрахунку. Вміти оперувати сучасною номенклатурою та термінологією в галузі комп'ютерної хімії	Лекції, практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-3, ПсК	20

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

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

6. Співвідношення результатів навчання дисципліни (РНД) із програмними результатами навчання (ПРН):

ПРН \ РНД (код)	1	2	3.1	3.2	4
Сучасні передові концептуальні та методологічні знання в галузі хімії та суміжних галузей знань (ЗУ-1)	+				
Знання праць провідних зарубіжних вчених та фундаментальних праць у галузі дослідження, формулювання мети власного наукового дослідження в контексті світового наукового процесу (ЗУ-2)	+				
Критичний аналіз, оцінка і синтез нових ідей (ЗУ-4)		+			
Уміння з нових дослідницьких позицій формулювати загальну методологічну базу власного наукового дослідження, усвідомлювати його актуальність (ЗУ-5)		+			+
Вміти формувати команду дослідників для вирішення локальної задачі (ЗУ-7)			+	+	
Аналізувати наукові праці в галузі хімії та суміжних наук, виявляючи дискусійні та мало досліджені питання (ЗУ-10)		+			
Здатність спілкування в діалоговому режимі з широкою науковою спільнотою та громадськістю в галузі хімії (К-1)			+	+	
Вміння кваліфіковано відображати результати наукових досліджень у наукових статтях в фахових виданнях, вести конструктивний діалог з рецензентами та редакторами (К-2)		+		+	+
Здатність професійно презентувати результати своїх досліджень на міжнародних наукових конференціях, семінарах (К-3)		+		+	+
Використовувати сучасні інформаційні та комунікативні технології при спілкуванні, обміні інформацією, зборі, аналізі, обробці, інтерпретації джерел (К-5)	+	+	+	+	+
Здатність діяти соціально відповідально та громадянсько свідомо і на основі, дотримуватися професійної та корпоративної етики (АВ-2)					+
Здатність саморозвиватися і самовдосконалюватися, нести відповідальність за новизну наукових досліджень та прийняття експертних рішень (АВ-3)		+	+	+	+

7. Схема формування оцінки

7.1. Форми оцінювання студентів:

- семестрове оцінювання

- 1.1. активність під час практичного заняття та оформлення результатів розрахунку;
- 1.3. виконання домашньої самостійної роботи;
- 1.4. виконання модульної контрольної роботи.

- підсумкове оцінювання

Іспит

Може До іспиту входять теми, що вивчаються самостійно.

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

	Змістовий модуль 1 (ЗМ ₁)			Змістовий модуль 2 (ЗМ ₂)			Змістовий модуль 3 (ЗМ ₃)			Змістовий модуль 4 (ЗМ ₄)			Іспит	Разом
	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3		
	5	1	7	1 5	2	2	5	2	8	9	2	2		
Мах. балів	13			19			15			13			40	100
Мін. балів *	8			11			9			8			24	60
Мін. балів **	5			6			5			4			40	60

1 - поточне оцінювання роботи в змістовому модулі (колоквіум, контрольна робота після 2 та 5 модулів)

2 - активність (виконання лабораторних робіт)

3 - самостійна (домашня) робота

* рекомендований мінімум; ** критичний мінімум

До іспиту може бути допущений аспірант, який виконав усі обов'язкові види робіт, які передбачаються навчальним планом з дисципліни "Комп'ютерне моделювання фізико-хімічної поведінки органічних сполук та полімерів" (а саме: виконання зазначених у програмі домашніх самостійних робіт, виконання модульних контрольних робіт, і при цьому за результатами модульно-рейтингового контролю в семестрі отримав за змістовні модулі сумарну оцінку менше 36 балів (критично 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 та перездачі МКР здійснюються у відповідності до Положення про організацію освітнього процесу у Київському національному університеті імені Тараса Шевченка від 31 серпня 2018 року

7.3. Шкала відповідності оцінок

Шкала відповідності

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

8. Структура навчальної дисципліни.

Тематичний план лекцій і практичних занять

№ теми	Назва теми	Кількість годин		
		лекції	практичні	С/Р
Частина 1 (теоретична)				
1.1	Сучасні напівемпіричні методи та їх особливості	2		4
1.2	Програми для виконання квантово-хімічних розрахунків.	1		4
1.3	Стандартні розрахунки	2		4
1.4	Побудова органічних молекул та мономерів	1		
1.5	Побудова полімерів	1		
1.6	Побудова полімеризаційних полімерів.	2		
1.7	Побудова поліконденсаційних полімерів	1		
1.8	Оптимізація геометрії молекул	1		8
1.9	Розрив молекул	2		4
1.10	Взаємодія радикалів з мономерами	2		
1.11	Взаємодія макрорадикалів з мономером	2		
1.12	Вивчення цис-транс ізомеризації	1		
Частина 2 (практична)				
<i>Змістовий модуль 1.</i>				
2.1	Побудова органічних молекул та мономерів			8
2.2.	Оптимізація геометрії молекул		1	8
<i>Змістовий модуль 2.</i>				
2.3	Побудова полімерів		1	
2.4	Побудова полімеризаційних полімерів.			8
2.5	Побудова поліконденсаційних полімерів.			8
<i>Змістовий модуль 3</i>				
2.6	Симуляція спектрів органічних сполук та полімерів		1	8
2.7	Симуляція ІЧ-спектрів			4
2.8	Симуляція УФ-спектрів			4
<i>Змістовий модуль 4.</i>				
2.9	Розрив органічних та полімерних молекул		1	8
2.10	Розрив органічних молекул			4
2.11	Розрив полімерних молекул			4
2.12	Взаємодія радикалів з мономерами			4
2.13	Вивчення цис-транс ізомеризації			4
	ВСЬОГО	18	4	96

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

Лекцій – **18 год.**,

Практичні – **4 год.**

Самостійна робота – **96 год.**

Консультації – **2 год**

Рекомендована література

Основна:

1. Колендо О.Ю. Комп'ютерне моделювання органічних сполук і полімерів. Київ, ВПЦ «Київський університет», 2017, 80 с.
2. Young D. MOPAC Computational Chemistry / D. Young. - Wiley-Interscience. - 2001. Appendix A. A.3.2 - P. 342.
3. Кларк Т. Компьютерная химия/ Т. Кларк. - М.: Мир, 1990. – 383 с.
4. Блатов В.А., Шевченко А.П. Методы компьютерной химии и комплекс программ HYPERCHEM/ В.А. Блатов, А.П. Шевченко - Самара «Самарский университет», 1999. – 54 с.
5. Лабораторный практикум «Квантово-химическое моделирование соединений в пакете HyperChem»: учеб.-метод. пособие / ФГБОУ ВПО "Кемеровский государственный университет"; сост. А.Л. Юдин. – Кемерово. - 2013. - 175 с.
6. Дегтяренко Н.Н. Описание программных пакетов для квантовых расчетов наносистем: учебное пособие/ Н.Н. Дегтяренко. - М.: МИФИ, 2008. – 180 с.
7. Аминова БР.М. Расчеты электронного строения и свойств молекул полуэмпирическими методами квантовой химии (методическое пособие для работы на компьютере) / Р.М. Аминова. – Казань, 1997. - 71 с.
8. Кобычев В.Б. Квантовая химия на ПК: Компьютерное моделирование молекулярных систем : учеб.-метод. пособие / В. Б. Кобычев. – Иркутск : Иркут. гос. ун-т, 2006. – 87 с.
9. Блатов В.А. Полуэмпирические расчетные методы квантовой химии: Учебное пособие / В.А. Блатов, А.П. Шевченко, Е.В. Пересыпкина. - Изд. 2-е. Самара: Изд-во «Универс-групп», 2005. - 32 с.
10. Блатов В.А. Неэмпирические расчетные методы квантовой химии / В.А. Блатов. - Самара: Изд-во «Самарский университет», 1996. – 45 с.
11. Полуэмпирические методы расчета электронной структуры / Под ред. Дж. Сигала. Т.1. - М.: Мир. - 1980. – 327 с.
12. J. A. Pople , D. P. Santry and G. A. Segal // Journal of Chemical Physics. – 1965. – V.43. – P.129.
13. Carreira L.A. INDO [intermediate neglect of differential overlap] calculations of properties of molecular complexes / L. A. Carreira, W. B. Person // J. Am. Chem. Soc. – 1972. – V. 94 (5). – P. 1485–1495.
14. Bingham R. Ground states of molecules. XXV. MINDO/3. Improved version of the MINDO semiempirical SCF-MO method / R. C. Bingham, M. J. S. Dewar, D.H. Lo // Journal of the American Chemical Society. – 1975. - V. 97 (6). – P. 1285.
15. Dewar M. Ground states of molecules. 38. The MNDO method. Approximations and parameters / M.J.S. Dewar, W.Thiel // Journal of the American Chemical Society. – 1977. –V.99 (15). – P. 4899.
16. Dewar M. Development and use of quantum mechanical molecular models. 76. AM1: A new general purpose quantum mechanical molecular model / M.J.S. Dewar, E.G. Zoebisch, E.F. Healy, J.J.P. Stewart // Journal of the American Chemical Society. – 1985. – V.107 (13). – P. 3902.
17. Stewart J. Optimization of parameters for semiempirical methods I. Method / J.J.P. Stewart // J. Comput. Chem. – 1989. – V.10 (2). – P. 209.
18. Dewar M. SAM1; the first of a new series of general purpose quantum mechanical molecular models / M.J.S. Dewar, C. Jie, J. Yu // Tetrahedron. – 1993. – V. 49 (23). – P. 5003.
19. Stewart J. Optimization of Parameters for Semiempirical Methods V: Modification of NDDO Approximations and Application to 70 Elements / J. J. P. Stewart // J. Mol. Mod. – 2007. – V.13. – P. 1173-1213.
20. Rocha G. B. RM1: A Reparameterization of AM1 for H, C, N, O, P, S, F, Cl, Br, and I / G. B. Rocha, R.O. Freire, A.M. Simas, J.J.P. Stewart // J. Computational Chemistry. - 2006. - V. 27. - N. 10. - P. 1101–1111.

Додаткова:

1. Levine, Ira N. (1991). *Quantum Chemistry*. Englewood Cliffs, New jersey: Prentice Hall. pp. 455–544. ISBN 978-0-205-12770-2.
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 та список посилань у статті.
2. https://en.wikipedia.org/wiki/Molecular_mechanics та список посилань у статті.
3. https://en.wikipedia.org/wiki/Semi-empirical_quantum_chemistry_method та список посилань у статті.
4. https://en.wikipedia.org/wiki/Density_functional_theory та список посилань у статті.
5. https://en.wikipedia.org/wiki/Ab_initio_quantum_chemistry_methods та список посилань у статті.