КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

Хімічний факультет
Кафедра хімії високомолекулярних сполук

«ЗАТВЕРДЖУЮ»
в.о заступника декана
з навчальної роботи
_____Наталія УСЕНКО
«__08__» ____05_____2025 року

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

КВАНТОВО-ХІМІЧНІ ДОСЛІДЖЕННЯ В ПОЛІМЕРНІЙ ХІМІЇ

для здобувачів освіти

галузь знань	*Е Природничі науки, математика і статистика*
спеціальність	*Е3 "Хімія"*
освітній рівень	*Магістр*
освітня програма	*Хімія*
вид дисципліни	*вибіркова*

Форма навчання	**денна**
Навчальний рік	**2025/2026**
Семестр	**II**
Кількість кредитів ECTS	**3.0**
Мова викладання, навчання та оцінювання	**українська**
Форма заключного контролю	**залік**

Викладач: асистент **Смокал Віталій Олегович**

Пролонговано: на 2026/2027 н.р._____

2027/2028 н.р. _____

КИЇВ – 2025

Розробник: **Смокал Віталій Олегович,** к.х.н., асистент кафедри хімії високомолекулярних сполук

Робоча програма дисципліни «Квантово-хімічні дослідження в полімерній хімії» затверджена :

Зав. кафедри хімії високомолекулярних сполук _____ Ірина САВЧЕНКО

Протокол № 12 від «21» квітня 2025 року

Схвалено науково - методичною комісією хімічного факультету

Протокол № 9 від "7" травня 2025 року

Голова науково-методичної комісії _____ Олександр РОЇК

1. Мета дисципліни – ознайомлення студентів з основними принципами квантово-хімічних розрахунків для органічних сполук та полімерів напівемпіричними та неемпіричними методами і прогнозування їх будови та спектральних властивостей. Навчити студентів користуватися сучасними комп'ютерними програмами необхідними при проведенні квантово-хімічних розрахунків, для симуляції будови та спектрів органічних сполук та полімерів.

2. Попередні вимоги до опанування навчальної дисципліни:
1. Знати загальну, органічну, полімерну, фізичну та фотохімію на рівні бакалавра за спеціальністю «Хімія».
2. Володіти навичками роботи на персональному комп'ютері на рівні бакалавра за спеціальністю «Хімія».
3. Володіти навичками пошуку інформації в науковій літературі.
4. Знати спецкурс «Сучасні методи дослідження сполук»

3. Анотація навчальної дисципліни. В курсі «Квантово-хімічні дослідження в полімерній хімії» розглянуто приклади порівняння експериментальних спектральних даних сполук та результати їх комп'ютерного моделювання квантово-хімічними напівемпіричними та неемпіричними методами. Розглянуто комп'ютерні програми, методи та базиси квантово-хімічних розрахунків необхідні для симуляції спектрів органічних сполук та полімерів. Наведено приклади користування цими програмами в кожному конкретному випадку.

4. Завдання: ознайомити студентів з основами та результатами теорій, що дають методи розрахунку, навчити студентів виконувати комп'ютерні розрахунки будови та деяких властивостей органічних сполук та полімерів, використовуючи стандартне та спеціальне програмне забезпечення. Навчити студентів використовувати набуті знання та вміння для обробки експериментальних даних, аналізу проведених розрахунків, інтерпретації даних і відображення та моделювання хімічних систем та процесів. Навчити студентів використовувати свої знання та розуміння на практиці для вирішення задач та проблем хімії.
Навчальна дисципліна спрямована на досягнення наступних загальних та спеціальних (фахових) компетентностей: ЗК1, ЗК2, ЗК7, ЗК14, та ФК2, ФК4, ФК5, ФК8, ФК9, ФК13.7, ФК14.7

5. Результати навчання за дисципліною:

Результати навчання (1 – знати; 2 – уміти; 3 – комунікація; 4 - автономність та відповідальність)	Форми викладання і навчання	**Методи оцінювання** поточний контроль (активність під час практичних робіт **ПтК-1** та контроль самостійної роботи **ПтК-2**), підсумковий контроль **ПсК**	Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни
1.1 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, самостійне опрацювання рекомендованої літератури.	ПтК-2, ПсК	10
2.1 Уміння користуватись програмами квантово-хімічних розрахунків та правильного інтерпретування результатів розрахунків і співвіднесення їх з результатами експерименту.	Лекції, практичні, самостійне опрацювання рекомендованої літератури.	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	40
3.1 Здатність використовувати сучасні інформаційно-комунікаційні технології при спілкуванні, а також для збору, аналізу, обробки, інтерпретації результатів розрахунку	практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	20
3.2 Здатність виконувати передбачені навчальною програмою завдання та операції у співпраці з іншими виконавцями	практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	10
4.1 Уміти самостійно фіксувати, та інтерпретувати результати розрахунку. Уміти оперувати сучасною номенклатурою та термінологією в галузі комп'ютерної хімії	практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	20

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

РНД (код) ПРН	1.1	2.1	3.1	3.2	4.1
ПРН19.7 Відтворювати методики одержання полімерних матеріалів, удосконалювати методи їх одержання та розширювати сфери їх застосування		+	+	+	+
ПРН20.7 Узагальнювати та інтерпретувати фізико-хімічні дані щодо будови та властивостей полімерів з урахуванням пріоритетності вимог їх екологічної безпеки та додержання екологічних стандартів	+		+	+	+

7. Схема формування оцінки

7.1. Форми оцінювання студентів:

Семестрове оцінювання:

Максимальна/мінімальна кількість балів, які можуть бути отримані студентом: **80 балів /48 балів,** а саме**:**

1. Контрольна робота №1:РН 1.1, РН 2.1, РН 3.1-3.2, РН 4.1– **20/12 балів**.
2. Контрольна робота №2:РН 1.1, РН 2.1, РН 3.1-3.2, РН 4.1– **20/12 балів**.
3. Завдання самостійної роботи: РН 1.1, РН 2.1, РН 3.1-3.2, РН 4.1 **-20/12 балів**.
4. Реферат: РН 1.1, РН 2.1, РН 3.1-3.2, РН 4.1– **20/12 балів**.

Підсумкове оцінювання (у формі заліку):

Максимальна/мінімальна кількість балів, які можуть бути отримані студентом: **20 балів /12 балів**.

Результати навчання, які будуть оцінюватись: РН 1.1, РН 2.1, РН 3.1-3.2, РН 4.1

Форма проведення: письмова робота.

Види завдань: два теоретичні питання 20 балів.

Для отримання загальної позитивної оцінки з дисципліни оцінка за залік не може бути меншою 12 балів.

Студент допускається до заліку, якщо протягом семестру він:

набрав не менше, ніж **48 балів,** написав реферат, виконав і вчасно здав завдання самостійної роботи.

7.2. Організація оцінювання:

Терміни проведення оцінювання:

Контрольна робота №1: не раніше **7 тижня** семестру;

Контрольна робота №2: не раніше **12 тижня** семестру;

Персональні завдання для написання реферату студенти отримують не пізніше, як за **8 тижнів** до закінчення семестру;

Оцінювання самостійної роботи: впродовж семестру.

7.3. Шкала відповідності оцінок

Оцінка (за національною шкалою) / National grade	Рівень досягнень / Marks
зараховано	60-100
Не зараховано	0-59

8. Структура навчальної дисципліни.

Тематичний план лекцій і практичних занять

№	Назва теми	Кількість годин		
		лекції	практичні	самостійні роботи
1	Сучасні напівемпіричні методи та їх особливості. Основні програми для виконання квантово-хімічних розрахунків	2		3
2	Побудова вихідних органічних молекул та мономерів	2		3
3	Побудова полімеризаційних полімерів	2		3
4	Стандартні розрахунки, програми симуляції спектрів	2		3
5	Оптимізація геометрії молекул	5		3
6	Побудова, оптимізація геометрії таутомерів напівемпіричним та неемпіричним методом і симуляція їх ІЧ-спектрів	3		3
7	Симуляція, побудова та порівняння УФ-спектрів таутомерів	2		3
8	Симуляція та порівняння ПМР-спектрів таутомерів. Бази спектрів. Пошук в інтернеті спектрів сполук.	2		3
9	Побудова та оптимізація геометрії таутомерів напівемпіричним методом		1	3
10	Симуляція та побудова ІЧ-спектрів таутомерів		1	3
11	Оптимізація геометрії таутомерів неемпіричним методом		2	3
12	Симуляція, побудова та порівняння ІЧ-спектрів таутомерів геометрію яких оптимізовано неемпіричним та напівемпіричним методом.		1	6
13	Симуляція та побудова УФ-спектрів таутомерів, геометрію яких оптимізовано напівемпіричним методом		1	3
14	Симуляція та побудова УФ-спектрів таутомерів, геометрію яких оптимізовано неемпіричним методом		1	3
15	Порівняння УФ-спектрів таутомерів, геометрію яких оптимізовано неемпіричним та напівемпіричним методом.		1	6
16	Симуляція та порівняння ПМР-спектрів таутомерів		1	3
17	Побудова ПМР-спектрів таутомерів та їх порівняння з експериментальними спектрами сполуки		1	6
	УСЬОГО	**20**	**10**	**60**

Загальний обсяг **90** год., у тому числі:
Лекції – **20** год.
Практичні – **10** год.; самостійні роботи – **60** год.

9. Рекомендовані джерела
Основні:

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. J.J.P. Stewart // Journal of the American Chemical Society. – 1985. – V.107 (13). – P. 3902.
4. Stewart J. Optimization of parameters for semiempirical methods I. Method / J.J.P. Stewart // J. Comput. Chem. – 1989. – V.10 (2). – P. 209.
5. Levine, Ira N. (1991). *Quantum Chemistry*. Englewood Cliffs, New jersey: Prentice Hall. pp. 455–544. ISBN 978-0-205-12770-2.
6. Leach, Dr Andrew (2001-01-30). *Molecular Modelling: Principles and Applications* (2 ed.). Harlow: Prentice Hall. ISBN 9780582382107.
7. Cramer, Christopher J. (2002). *Essentials of Computational Chemistry*. Chichester: John Wiley & Sons, Ltd. pp. 232. ISBN 978-0-471-48552-0.
8. *C. K. Ingold*. G. Bell and Sons, Structure and Mechanism in *Organic Chemistry*. Front Cover,1953 - Chemistry, Organic - 828 pages.
9. G.A. Segal Semiempirical Methods of Electronic Structure Calculation Modern Theoretical Chemistry V.7, Springer New York, NY, 274 p.
10. Stewart J.J.P. Mopac2009, Version 9.189W, Stewart computational chemistry, Colorado Springs, CO 2009. Available at http://openmopac.net
11. Curtiss L. Assessment of Gaussian-3 and density functional theories for a larger experimental test set / L.A. Curtiss, K. Raghavachari, P.C. Redfern, J.A. Pople // J. Chem. Phys. - 2000. — V. 112. - Fasc. 17. – P. 7374-7383.
12. Stewart J.J.P. MOPAC 2012 / J.J.P. Stewart. Stewart Computational Chemistry. Colorado Springs, CO. – 2014 Available at http://openmopac.net
13. 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.
14. 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.

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.