



Розробник: **Пивоваренко Василь Георгійович**, *д.х.н., професор кафедри органічної хімії*

Затверджено « 16 » березня 2021 року


Завідувач кафедри органічної хімії

  
\_\_\_\_\_ В.П. Хиля  
(підпис)

Протокол № 16 від “16” березня 2021 року

Схвалено науково-методичною комісією хімічного факультету

Протокол № 7 від “20” квітня 2021 року

Голова науково-методичної комісії  \_\_\_\_\_ О.С.Роїк  
«20» квітня 2021 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, організувати 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):

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

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