

**КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА**

Хімічний факультет
Кафедра органічної хімії

«ЗАТВЕРДЖУЮ»

Заступник декана
навчальної роботи



Наталія УСЕНКО

6 червня 2023 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 **дисципліна вільного вибору аспіранта**

Форма навчання **денна**
Навчальний рік **2021/2022**
Період навчання **2 курс**
Семестр **II**
Кількість кредитів ECTS **4 кредити**
Мова викладання, навчання та оцінювання **українська**
Форма заключного контролю **іспит**

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

Пролонговано: на **2024/2025** н.р. _____ (_____) «__» _____ 20__ р.

на **2025/2026** н.р. _____ (_____) «__» _____ 20__ р.

КИЇВ – 2023

Розробники): **Пивоваренко Василь Георгійович**

ЗАТВЕРДЖЕНО

Завідувач кафедри органічної хімії



Олександр ГРИГОРЕНКО

Протокол № 15 від «09» травня 2023 р.

Схвалено науково-методичною комісією хімічного факультету

Протокол № 17 від «06» червня 2023 року

Голова науково-методичної комісії



Олександр ПОЇК

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

2. Попередні вимоги до опанування навчальної дисципліни:

1. Знати загальну хімію на рівні магістра за спеціальністю «Хімія».
2. Знати органічну хімію на рівні магістра за спеціальністю «Хімія».
3. Знати аналітичну хімію на рівні магістра за спеціальністю «Хімія».
4. Знати фізичну хімію на рівні магістра за спеціальністю «Хімія».
5. Володіти комп'ютером на рівні магістра за спеціальністю «Хімія».

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 базиси 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 потенціальних кривих 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.

5. Результати навчання за дисципліною

Код	Результат навчання	Форми викладання і навчання	Методи оцінювання поточний контроль ПтК-1, ПтК-2 та ПтК-3), підсумковий контроль ПсК	Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни
1. Знання				
1.1	Знати принципи і методи квантово-хімічних розрахунків будови органічних сполук	лекції, самостійні	ПтК-2, ПтК-3, ПсК	15
1.2	Знати перелік характеристик органічних сполук, що розраховуються квантово-хімічними методами та шляхи їх розрахунку	лекції, самостійні	ПтК-2, ПтК-3, ПсК	10

1.3	Знати принципи і методи квантово-хімічних розрахунків конформаційної обмеженості органічних сполук	лекції, самостійні	ПтК-1, ПтК-3, ПсК	15
2. Вміння				
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. Комунікація				
3.1	Здатність використовувати сучасні інформаційно-комунікаційні технології при спілкуванні, а також для збору, аналізу, обробки та інтерпретації даних	лекції, практичні, самостійні	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	ПтК-1, ПтК-3, ПсК	5
4. Автономність та відповідальність				
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

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

ПРН	РНД (код)										
	1.1	1.2	1.3	2.1	2.2	2.3	3.1	3.2	4.1	4.2	
Знання Сучасні передові концептуальні та методологічні знання в галузі хімії та суміжних галузей знань.	+	+	+								
Знання праць провідних зарубіжних вчених, наукових шкіл та фундаментальних праць у галузі дослідження, формулювання мети власного наукового дослідження в контексті світового наукового процесу.	+	+	+								
Знати принципи фінансування науково-дослідної роботи та структуру кошторисів на її виконання, вміння підготувати запит на отримання фінансування, звітну документацію.											
Уміння Критичний аналіз, оцінка і синтез нових ідей.				+							
Уміння з нових дослідницьких позицій формулювати загальну методологічну базу власного наукового дослідження, усвідомлювати його актуальність, мету і значення для розвитку інших галузей науки, суспільно-політичного, економічного життя.					+					+	
Ініціювати, організувати та проводити комплексні дослідження в галузі науково-дослідницької та інноваційної діяльності, які приводять до отримання нових знань.						+	+				
Вміти формувати команду дослідників для вирішення локальної задачі (формулювання дослідницької проблеми, робочих гіпотез, збору інформації, підготовки пропозицій).						+	+	+	+		
Вміння формулювати наукову проблему з огляду на сучасні наукові тенденції.				+							
Формулювати робочі гіпотези та моделі досліджуваної проблеми.				+	+	+					
Аналізувати наукові праці в галузі хімії та суміжних наук, виявляючи дискусійні та мало досліджені питання.				+							
Моніторинг наукових джерел інформації відносно досліджуваної проблеми.				+						+	
Здійснювати процедуру встановлення інформаційної цінності джерел шляхом порівняльного аналізу з іншими джерелами.				+						+	

ПРН	РНД (код)										
	1.1	1.2	1.3	2.1	2.2	2.3	3.1	3.2	4.1	4.2	
Визначати принципи та методи дослідження, використовуючи міждисциплінарні підходи.			+	+						+	
Комунікація Здатність спілкування в діалоговому режимі з широкою науковою спільнотою та громадськістю в галузі хімії.								+	+		
Вміння кваліфіковано відображати результати наукових досліджень у наукових статтях в фахових виданнях, вести конструктивний діалог з рецензентами та редакторами.				+					+	+	+
Здатність професійно презентувати результати своїх досліджень на міжнародних наукових конференціях, семінарах, практично використовувати іноземну мову (в першу чергу - англійську) у науковій, інноваційній та педагогічній діяльності.				+					+	+	+
Здатність працювати в команді, мати навички міжособистісної взаємодії.								+	+		+
Використовувати сучасні інформаційні та комунікативні технології при спілкуванні, обміні інформацією, зборі, аналізі, обробці, інтерпретації джерел.	+	+	+	+	+	+	+	+	+		
Автономія та відповідальність Ініціювання наукових та інноваційних комплексних проектів в галузі хімії, лідерство та автономність під час їх реалізації.										+	+
Здатність діяти соціально відповідально та громадянсько свідомо і на основі, дотримуватися професійної та корпоративної етики.											+
Здатність саморозвиватися і самовдосконалюватися, нести відповідальність за новизну наукових досліджень та прийняття експертних рішень.	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+
Здатність приймати обґрунтовані рішення, мотивувати людей.	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+

7. Схема формування оцінки

7.1. Форми оцінювання студентів:

- семестрове оцінювання

- 1.1. активність під час практичних занять;
- 1.2. виконання домашнього самостійного завдання;
- 1.3. написання контрольної роботи.

- підсумкове оцінювання

іспит.

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	1	3	1	3		
Виконання домашньої самостійної роботи	3	5	3	5		
Модульна контрольна робота 1	14	30				
Модульна контрольна робота 2			14	30	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 домашніх самостійних робіт, написання 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 „Положення про порядок оцінювання знань студентів при кредитно-модульній системі організації навчального процесу” від 1 жовтня 2010 року.

7.3. Шкала відповідності оцінок

За 100 – бальною шкалою	За національною шкалою	
90 – 100	5	відмінно / excellent
85 – 89	4	добре / good
75 – 84		
65 – 74	3	задовільно / satisfactory
60 – 64		
0 – 59	2	не задовільно / fail

8. Структура навчальної дисципліни.

Тематичний план лекцій

№ теми	Назва теми	Кількість годин		
		лекції	практ	С/Р
Змістовий модуль 1.				
<i>Теорія та принципи квантово-хімічних розрахунків</i>				
1	Принципи квантово-хімічних розрахунків просторової та електронної будови органічних молекул.	2		10
2	Методи та базиси квантово-хімічних розрахунків	2		10
3	Розрахунки енергії конформацій	2		10
3	Розрахунки поверхонь потенціальної енергії конформаційних переходів	2		10
4	Підходи та методи розрахунку конформаційної обмеженості та структурної жорсткості сполук	4		10
5	Розрахунок кривих потенціальної енергії хімічних перетворень	3		10
6	Врахування ефектів міжмолекулярних взаємодій у квантово-хімічних розрахунках	2		10
7	Модульна контрольна робота 1	1		
Змістовий модуль 2.				
<i>Виконання практичних задач квантово-хімічних розрахунків</i>				
8	Виконання окремих операцій у середовищі програми хімічного моделювання "HyperChem"	2	1	20
9	Виконання окремих операцій у середовищі програми квантово-хімічних розрахунків "MORAC".	3	1	20
10	Розрахунок торсійних енергій молекули	4	2	30
11	Розрахунок заселеності конформаційних станів	4	2	30
12	Розрахунок активаційних бар'єрів хімічних процесів	4	2	22
15	Модульна контрольна робота 2	1		
	ВСЬОГО	36		192

Загальний обсяг **240 год.**, в тому числі:

Лекцій – **36 год.**

Практичні заняття – **8 год.**

Консультації – **4 год.**

Самостійна робота - **192 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 та список посилань у статті.
5. https://en.wikipedia.org/wiki/Molecular_mechanics та список посилань у статті.
6. https://en.wikipedia.org/wiki/Semi-empirical_quantum_chemistry_method та список посилань у статті.
7. https://en.wikipedia.org/wiki/Density_functional_theory та список посилань у статті.
8. 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.
3. Leach, Dr Andrew (2001-01-30). *Molecular Modelling: Principles and Applications* (2 ed.). Harlow: Prentice Hall. ISBN 9780582382107.
4. 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.
5. 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.