

КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

Хімічний факультет
Кафедра хімії високомолекулярних сполук

«ЗАТВЕРДЖУЮ»

Заступник декана
з навчальної роботи



N. Usenko Наталія УСЕНКО

30 » 06 2022 року

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ
КВАНТОВО-ХІМІЧНІ ДОСЛІДЖЕННЯ В ПОЛІМЕРНІЙ ХІМІЇ

для здобувачів освіти

галузі знань **10 Природничі науки**
спеціальність **102Хімія**
освітній рівень **магістр**
освітня програма **Хімія**
вид дисципліни **вибіркова**

Форма навчання	денна
Навчальний рік	2022/2023
Семестр	2
Кількість кредитів ECTS	3.0
Мова викладання, навчання та оцінювання	українська
Форма заключного контролю	залік

Викладач: професор **Колендо Олексій Юрійович**


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

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

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

ЗАТВЕРДЖЕНО

Завідувач кафедри хімії високомолекулярних сполук

 Ірина САВЧЕНКО

Протокол № 17 від «1» червня 2022 р.

Схвалено науково-методичною комісією хімічного факультету

Протокол № 7 від «29» червня 2022 року

Голова науково-методичної комісії  Олександр ПОЇК

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

5. Результати навчання за дисципліною:

Результати навчання (1 – знати; 2 – уміти; 3 – комунікація; 4 - автономність та відповідальність)	Форми викладання і навчання	Методи оцінювання *	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

* поточний контроль (активність під час практичних робіт **ПтК-1** та контроль самостійної роботи **ПтК-2**), підсумковий контроль **ПсК**

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

ПРН	РНД (код)				
	1.1	2.1	3.1	3.2	4.1
Р2. Глибоко розуміти основні факти, концепції, принципи і теорії, що стосуються предметної області, опанованої у ході магістерської програми, використовувати їх для розв'язання складних задач і проблем, а також проведення досліджень з відповідного напрямку хімії.	+	+	+	+	+
Р5. Володіти методами комп'ютерного моделювання структури, параметрів і динаміки хімічних систем.	+	+	+	+	+
Р9. Збирати, оцінювати та аналізувати дані, необхідні для розв'язання складних задач хімії, використовуючи відповідні методи та інструменти роботи з даними.	+	+	+		+
Р13. Аналізувати наукові проблеми та пропонувати їх вирішення на абстрактному рівні шляхом декомпозиції їх на складові, які можна дослідити окремо.	+	+	+		+

7. Схема формування оцінки

7.1. Форми оцінювання здобувачів освіти:

- **семестрове оцінювання** (Максимальна/мінімальна кількість балів, які можуть бути отримані здобувачем освіти: 80 балів /48 балів)

- 1.1. активність під час практичних занять;
- 1.2. виконання домашньої самостійної роботи;
- 1.3. написання модульної контрольної роботи.

- Підсумкове оцінювання (у формі заліку):

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

Форма проведення: письмова робота.

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

Здобувач освіти допускається до заліку, якщо протягом семестру він набрав не менше, ніж **48 балів** та виконав і вчасно здав всі модульні роботи.

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

Оцінювання за формами контролю:

	ЗМ1		ЗМ2	
	<i>Min. – 24 бали</i>	<i>Max. – 40 балів</i>	<i>Min. – 24 бали</i>	<i>Max. – 40 балів</i>
Усна відповідь	1	1	1	1
Доповнення	1	1	1	1
Практична робота	2	4	2	4
Самостійна робота	2	4	2	4
Модульна контрольна робота 1	18	30		
Модульна контрольна робота 2			18	30

Терміни проведення оцінювання:

Контрольна робота №1: не раніше **5 тижня** семестру;

Контрольна робота №2: не раніше **10 тижня** семестру;

Практичні роботи виконуються протягом семестру;

Оцінювання самостійної роботи: впродовж семестру.

Для студентів, які набрали сумарно меншу кількість балів ніж *критично-розрахунковий мінімум – 48 балів* для одержання заліку обов'язково слід відпрацювати всі заборгованості та написати модульні контрольні роботи.

При простому розрахунку отримаємо:

	Змістовий модуль1	Змістовий модуль2	залік	Підсумкова оцінка
Мінімум	24	24	12	60
Максимум	40	40	20	100

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, практичних та самостійних робіт

№	теми	Кількість годин		
		лекції	практичні	самостійні роботи
1	Програми для виконання квантово-хімічних розрахунків.	2		3
2	Програми для симуляції спектрів.	2		3
3	Вивчення кето-енольної таутомерії за допомогою квантово-хімічних розрахунків.	2		3
4	Вивчення лактим-лактамною таутомерії за допомогою квантово-хімічних розрахунків.	2		3
5	Побудова, оптимізація геометрії таутомерів напівемпіричним та неемпіричним методом і симуляція їх ІЧ-спектрів	5		3
6	Симуляція, побудова та порівняння УФ-спектрів таутомерів	3		3
7	Симуляція та порівняння ПМР-спектрів таутомерів	2		3
8	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.