

КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ  
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

Хімічний факультет  
Кафедра хімії високомолекулярних сполук

«ЗАТВЕРДЖУЮ»

Заступник декана  
з навчальної роботи

Павленко В.О.

Хімічний факультет  
« 30 » травня 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 102 Хімія  
освітній рівень третій (освітньо-науковий)  
освітня програма Хімія  
вид дисципліни вибіркова

Форма навчання денна  
Навчальний рік 2018/2019  
Період навчання 2 рік навчання  
Кількість кредитів ECTS 8 кредитів  
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. О. Савченко ) « 3 » 04 2019 р.  
на 2020/2021 н.р. ( ) « » 20 р.

**КИЇВ – 2018**

затверджена на засіданні кафедри хімії високомолекулярних сполук

Протокол № 12 від "11" травня 2018 року

Завідувач кафедри І.Савченко (Савченко І.О.)

Схвалено науково - методичною комісією факультету за напрямом підготовки  
0401 Природничі науки, спеціальністю 04010101 Хімія

Голова науково-методичної комісії В.М.Амірханов (Амірханов В.М)

Протокол № ..6...від "...30..." 05 2018 року

Голова науково-методичної комісії О.С.Ройк (Ройк О.С.)

« 3 » 04 2019 року

Протокол № .....від "....." 20\_\_ року

Голова науково-методичної комісії \_\_\_\_\_ (\_\_\_\_\_)

« \_\_\_\_ » \_\_\_\_\_ 20\_\_ року

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

**2. Попередні вимоги до опанування навчальної дисципліни:**

1. Знання основ органічної хімії.
2. Знання основ полімерної хімії.
3. Знання основ фотохімії.
4. Володіння навичками роботи на персональному компютері.

**3. Анотація навчальної дисципліни.** Дисципліна «Компютерне 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 та органічній хімії та результати їх комп'ютерного моделювання. Розглянуто комп'ютерні програми необхідні для моделювання експерименту та 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.

**5. Результати навчання за дисципліною:**

Код	Результат навчання	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
<b>1. Знання</b>				

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-2, ПсК	10
<b>2. Вміння</b>				
2.	використання комп'ютеру для проведення квантово хімічних розрахунків та правильного інтерпретування результатів розрахунків та співвіднесення їх з результатами експерименту.	практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	40
<b>3. Комунікація</b>				
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, 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
<b>4. Автономність та відповідальність</b>				
4.	Вміти самостійно фіксувати, та інтерпретувати результати розрахунку	практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	20

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

ПРН \ РНД (код)	1	2	3.1	3.2	4
<b>Знання</b>					
Базові методологічні знання та розуміння основ хімії та суміжних галузей знань	+	+			
Здатність розуміти та інтерпретувати основи фізики та математики на рівні, достатньому для використання їх у різних сферах хімії	+	+			
Знання хімічної термінології та номенклатури, спроможність описувати хімічні дані у символічному вигляді	+	+			
Знання основних типів хімічних реакцій та їх характеристики					
Здатність пояснити зв'язок між будовою та властивостями речовин	+	+			
Знання та розуміння періодичного закону та періодичної системи елементів, здатність описувати, пояснювати та передбачати властивості хімічних елементів та сполук на їх основі	+	+			
Знання основних принципів квантової механіки, здатність застосовувати їх для опису будови атома, молекул та хімічного зв'язку	+	+			
Базові знання принципів і процедур фізичних, хімічних, фізико-хімічних методів дослідження, типового обладнання та приладів		+			+
Знання основ планування та проведення експериментів, методики та техніки приготування розчинів та реагентів		+			+
Знання основних принципів термодинаміки та хімічної кінетики, здатність до їх застосування для рішення практичних задач	+	+			
Знання основних способів одержання полімерів, включаючи полімеризацію, поліконденсацію та полімераналогічні перетворення полімерів		+			
<b>Уміння</b>					
Здійснювати критичний аналіз, оцінювати дані та синтезувати нові ідеї		+	+	+	
Здійснювати експериментальну роботу під керівництвом, з метою перевірки гіпотез та дослідження явищ і хімічних закономірностей			+	+	+
Спроможність використовувати набуті знання та вміння для розрахунків, відображення та моделювання хімічних систем та процесів, обробки експериментальних даних.	+	+	+	+	+

ПРН \ РНД (код)	1	2	3.1	3.2	4
Виконувати комп'ютерні обчислення, що мають відношення до хімічних проблем, використовуючи стандартне та спеціальне програмне забезпечення, навички аналізу та відображення результатів.	+	+	+	+	+
Працювати самостійно або в групі, отримати результат у межах обмеженого часу з наголосом на професійну сумлінність та наукову добросесність.			+	+	+
Демонструвати знання та розуміння основних фактів, концепцій, принципів та теорій з хімії.	+	+			
Використовувати свої знання та розуміння на практиці для вирішення задач та проблем відомої природи.	+	+	+	+	+
Готувати розчини та реагенти, планувати та здійснювати хімічні експерименти.					+
Інтерпретувати експериментально отримані дані та співвідносити їх з відповідними теоріями в хімії.	+		+	+	
Здійснювати моніторинг та аналіз наукових джерел інформації та фахової літератури.		+	+	+	
Використовувати набуті знання та компетенції з хімії в прикладному полі, базові інженерно-технологічні навички.		+	+	+	
<b>Комунікація</b> Здатність до фахового спілкування в діалоговому режимі з колегами та цільовою аудиторією.		+	+	+	+
Вміння коректно використовувати мовні засоби в професійній діяльності залежно від мети спілкування.		+	+	+	
Вміння відображати результати своїх наукових досліджень у письмовому вигляді.		+	+	+	+
Здатність до презентації результатів своїх досліджень.		+	+	+	
Здатність працювати в міждисциплінарній команді, мати навички міжособистісної взаємодії.		+	+	+	+
Здатність використовувати сучасні інформаційно-комунікаційні технології при спілкуванні, а також для збору, аналізу, обробки, інтерпретації даних.		+	+	+	+
<b>Автономія та відповідальність</b> Здатність вести професійну діяльність з найменшими ризиками для навколишнього середовища.	+				+
Здатність діяти соціально відповідально та громадянсько свідомо на основі етичних міркувань.	+	+	+	+	+

<b>ПРН</b>	<b>РНД (код)</b>	<b>1</b>	<b>2</b>	<b>3.1</b>	<b>3.2</b>	<b>4</b>
	Здатність вчитись самостійно та самовдосконалюватися, нести відповідальність за власні судження та результати.	+	+	+	+	+
	Здатність приймати обґрунтовані рішення та рухатися до спільної мети.	+	+	+	+	+

## **7. Схема формування оцінки**

**7.1 Форми оцінювання здобувачів:** *(зазначається перелік видів робіт та форм їх контролю / оцінювання із зазначенням результатів навчання які на них мають бути оцінені, а також кількість балів/відсоток у підсумковій оцінці із дисципліни, пороговий рівень позитивної оцінки)*

- **Оцінювання під час навчального періоду:**
  - 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 (у формі іспиту/комплексного іспиту, диференційованого заліку)**
  - Іспит

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

	Змістовий модуль 1 (ЗМ <sub>1</sub> )			Змістовий модуль 2 (ЗМ <sub>2</sub> )			Змістовий модуль 3 (ЗМ <sub>3</sub> )			Змістовий модуль 4 (ЗМ <sub>4</sub> )			Змістовий модуль 5 (ЗМ <sub>5</sub> )			Іспит	Разом
	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3		
	5	1	2	15	2	2	5	2	2	9	2	2	10	1	0		
Max. балів	8			19			9			13			11			40	100
Min. балів*	5			11			5			8			7			24	60
Min. балів**	3			6			3			4			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 не менше 20 балів (критично розрахунковий мінімум при формі підсумкового контролю – іспит).

Для аспірантів, які набрали впродовж семестру сумарно меншу кількість балів ніж критично-розрахунковий мінімум для заліку або критично-розрахунковий мінімум для допуску до іспиту допускається перескладання МКР, за які отримана незадовільна оцінка, з дозволу деканату (за наявності поважної причини, що не дозволила вчасно та якісно підготуватися до МКР).

У випадку відсутності аспіранта з поважних причин відпрацювання та перездачі МКР 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

Оцінка (за національною шкалою) / National grade	Рівень досягнень, % / Marks, %
Відмінно / Excellent	90-100%
Добре / Good	75-89%
Задовільно / Satisfactory	60-74%
Незадовільно / Fail	0-59%
Зараховано / Passed	60-100
Не зараховано / Fail	0-59

## 8. Структура навчальної дисципліни.

Тематичний план лекцій і практичних занять



№ теми	Назва теми	Кількість годин		
		лекції	практичні	С/Р
<b>Частина 1 (теоретична)</b>				
1.1	Сучасні напівемпіричні методи та їх особливості	3		8
1.2	Програми для виконання квантово-хімічних розрахунків.	3		8
1.3	Стандартні розрахунки	3		8
1.4	Побудова органічних молекул та мономерів	2		
1.5	Побудова полімерів	3		
1.6	Побудова полімеризаційних полімерів.	3		
1.7	Побудова поліконденсаційних полімерів	3		
1.8	Оптимізація геометрії молекул	4		8
1.9	Розрив молекул	4		
1.10	Взаємодія радикалів з мономерами	2		
1.11	Взаємодія макрорадикалів з мономером	2		
1.12	Вивчення цис-транс ізомеризації	4		
<b>Частина 2 (практична)</b>				
<i>Змістовий модуль 1.</i>				
2.1	Побудова органічних молекул та мономерів		1	16
2.2.	Оптимізація геометрії молекул		2	16
<i>Змістовий модуль 2.</i>				
2.3	Побудова полімерів		2	
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			16
2.8	Симуляція УФ-спектрів			16
<i>Змістовий модуль 4.</i>				
2.9	Розрив органічних та полімерних молекул		1	8
2.10	Розрив органічних молекул			16
2.11	Розрив полімерних молекул			16
2.12	Взаємодія радикалів з мономерами			12
<i>Змістовий модуль 5.</i>				
2.13	Вивчення цис-транс ізомеризації		1	20
	<b>ВСЬОГО</b>	<b>36</b>	<b>8</b>	<b>192</b>

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

Лекцій – **36 год.**,

Практичні – **8 год.**

Самостійна робота – **192 год.**

**Консультації – 4 год**

## Рекомендована література

1. Young D. MOPAC Computational Chemistry / D. Young. - Wiley-Interscience. - 2001. Appendix A. A.3.2 - P. 342.
2. Кларк Т. Компьютерная химия/ Т. Кларк. - М.: Мир, 1990. – 383 с.
3. 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.
4. 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.
5. Дегтяренко Н.Н. Описание программных пакетов для квантовых расчетов наносистем: учебное пособие/ Н.Н. Дегтяренко. - М.: МИФИ, 2008. – 180 с.
6. Аминова Р.М. Расчеты электронного строения и свойств молекул полуэмпирическими методами квантовой химии (методическое пособие для работы на компьютере) / Р.М. Аминова. – Казань, 1997. - 71 с.
7. 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.
8. 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.
9. Блатов В.А. Неэмпирические расчетные методы квантовой химии / В.А. Блатов. - Самара: Изд-во «Самарский университет», 1996. – 45 с.
10. Полуэмпирические методы расчета электронной структуры / Под ред. Дж. Сигала. Т.1. - М.: Мир. - 1980. – 327 с.
11. J. A. Pople , D. P. Santry and G. A. Segal // Journal of Chemical Physics. – 1965. – V.43. – P.129.
12. 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.
13. 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.
14. 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.
15. 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.
16. Stewart J. Optimization of parameters for semiempirical methods I. Method / J.J.P. Stewart // J. Comput. Chem. – 1989. – V.10 (2). – P. 209.
17. 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.

18. 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.
19. 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.