

**КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА**

Хімічний факультет

Кафедра хімії високомолекулярних сполук

«ЗАТВЕРДЖУЮ»

Заступник декана
з навчальної роботи

Павленко В.О.

Хімічний
факультет

« 30 » квітня 2018 року

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

***КВАНТОВО ХІМІЧНІ ДОСЛІДЖЕННЯ
В ПОЛІМЕРНІЙ ХІМІЇ***

для студентів

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

Форма навчання **денна**

Навчальний рік **2018/2019**

Семестр **I**

Кількість кредитів ECTS **4,0 кредити** (II семестр
програми підготовки за ОР «магістр»)

Мова викладання, навчання та оцінювання
українська

Форма заключного контролю **залік**

Викладач (лектор): **Колендо Олексій Юрійович**

Пролонговано: на **2019/2020** н.р. Д. 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 Савченко І.О. (Савченко І.О.)

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

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

Протокол № ..6...від "...3.0..." 05 2018 року

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

« 3 » 04 2019 року

Протокол №від "....." 20__ року

Голова науково-методичної комісії _____ (_____)

« _____ » _____ 20__ року

1. Мета дисципліни – вивчення основних принципів квантово хімічних розрахунків органічних сполук та полімерів, що проводяться в напівемпічному наближенні на сучасних персональних комп'ютерах.

2. Завдання – навчити студентів робити квантово хімічні розрахунки та графічно обробляти одержані дані.

Структура курсу

В результаті вивчення навчальної дисципліни студент повинен

3. Знати: основи прогнозування властивостей сполук та можливості використовувати набуті знання при проведенні наукових досліджень. Студенти повинні мати чіткі уявлення про основні методи розрахунків, які використовуються в хімії та межах їх застосування. Це дозволить їм обрати потрібні наближення та методи і вірно інтерпретувати одержані результати.

вміти: використовувати комп'ютер для проведення квантово хімічних розрахунків та правильно інтерпретувати результати розрахунків та співвідносити їх з результатами експерименту.

4. Місце дисципліни (в структурно-логічній схемі підготовки фахівців відповідного напрямку).

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
1. Знання				
1.1	1.1. Знати місце полімерів в системі хімічних наук	лекції, самостійні	ПтК-2, ПсК	5
1.2	1.2. Знати основні класи полімерів	лекції, практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	10
1.3	1.3. Знати області застосування полімерів	лекції, практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	15
2. Вміння				

2.1	2.1. Знайти у першоджерелах інформацію про методи одержання полімерів, і їх фізичні та хімічні властивості;	практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	10
2.2	2.2. Визначати методи одержання конкретного виду полімерного матеріалу для певної області його застосування	лекції, самостійні	ПтК-1	20
3. Комунікація				
3.1	3.1. Здатність використовувати сучасні інформаційно-комунікаційні технології при спілкуванні, а також для збору, аналізу, обробки, інтерпретації інформації у галузі полімерної хімії та біологічно активних полімерів	лекції, практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	5
3.2	3.2. Здатність виконувати передбачені навчальною програмою завдання та операції у співпраці з іншими виконавцями	практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	5
4. Автономність та відповідальність				
4.1	4.1. Вміти самостійно фіксувати, інтерпретувати та відтворити результати пошуку	практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	10

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 Базові методологічні знання та розуміння основ хімії та суміжних галузей знань	+			+								
Здатність розуміти та інтерпретувати полімери на рівні, достатньому для використання їх у різних сферах хімії	+			+								

ПРН	РНД (код)										
	1.1	1.2	1.3	2.1	2.2	2.3	3.1	3.2	4.1	4.2	
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	+	+	+	+							
Здатність описувати, пояснювати та передбачати властивості полімерних сполук	+	+	+	+							
Мати глибокі знання в галузі інформаційних і комунікаційних технологій, що застосовуються у професійній діяльності	+			+							
Базові знання принципів і процедур фізичних, хімічних, фізико-хімічних методів дослідження, типового обладнання та приладів				+	+	+			+	+	
Знати 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	+			+							
Здатність описувати властивості аліфатичних, ароматичних, гетероциклічних та органометалічних сполук, пояснювати природу та поведінку функціональних груп в органічних молекулах		+	+	+	+	+					
Знання основних шляхів синтезу в органічній хімії, включаючи функціональні групові взаємоперетворення та формування зв'язку карбон-карбон, карбон-гетероатом		+	+	+	+	+					

ПРН	РНД (код)										
	1.1	1.2	1.3	2.1	2.2	2.3	3.1	3.2	4.1	4.2	
Уміння 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.	+				+	+					
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 добросовісність.							+	+	+	+	
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.	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	
Здійснювати моніторинг та аналіз наукових джерел інформації та фахової літератури.				+			+	+			
Використовувати набуті знання та компетенції з хімії в прикладному полі, базові інженерно-технологічні навички.				+			+	+			
Комунікація Здатність до фахового спілкування в діалоговому режимі з колегами та цільовою аудиторією.				+			+	+	+	+	

ПРН	РНД (код)										
	1.1	1.2	1.3	2.1	2.2	2.3	3.1	3.2	4.1	4.2	
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.				+		+	+	+	+	+	
Автономія та відповідальність Здатність вести професійну діяльність з найменшими ризиками для навколишнього середовища.	+								+	+	
Здатність діяти соціально відповідально та громадянсько свідомо на основі етичних міркувань.	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	
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 студентів:

- семестрове оцінювання

- 1.1. виконання домашньої самостійної роботи;
- 1.2. активність під час практичного заняття та оформлення результатів літературного пошуку;
- 1.3. написання модульної контрольної роботи.

- підсумкове оцінювання

іспит.

Контроль знань і розподіл балів, які отримують студенти.

Контроль здійснюється за модульно-рейтинговою системою. Форми контролю: поточний і підсумковий.

У змістовий модуль 1 (ЗМ1) входять теми 1 - 3, у змістовий модуль 2 (ЗМ2) – теми - 4-8, у змістовий модуль 3 (ЗМ3) – теми - 9-12. Обов'язковим для іспиту є набрати не менше як 36 балів за 3 змістовні модулі.

Оцінювання за формами контролю:

	ЗМ1		ЗМ2		ЗМ3	
	<i>Min. – 14 балів</i>	<i>Max. – 20 балів</i>	<i>Min. – 12 балів</i>	<i>Max. – 20 балів</i>	<i>Min. – 12 балів</i>	<i>Max. – 20 балів</i>
Практична робота	3	4	3	4	3	4
Самостійна робота	1	2	1	2	1	2
...						
Модульна контрольна робота 1	10	14				
Модульна контрольна робота 2			9	14		
Модульна контрольна робота 3					9	14

Для студентів, які набрали сумарно меншу кількість балів ніж *критично-розрахунковий мінімум – 36 балів* для одержання іспиту/заліку обов'язково написати модульні контрольні роботи (*слід зазначити умови, які висуває лектор*).

У випадку відсутності студента 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.

При простому розрахунку отримаємо:

	Змістовий модуль1	Змістовий модуль2	Змістовий модуль3	іспит	Підсумкова оцінка
<i>Мінімум</i>	<i>12</i>	<i>12</i>	<i>12</i>	<i>36</i>	<i>60</i>
Максимум	20	20	20	40	100

При цьому, кількість балів:

- **1-34** відповідає оцінці «незадовільно» з обов'язковим повторним вивченням дисципліни;
- **35-59** відповідає оцінці «незадовільно» з можливістю повторного складання;
- **60-64** відповідає оцінці «задовільно» («достатньо»);
- **65-74** відповідає оцінці «задовільно»;
- **75 - 84** відповідає оцінці «добре»;
- **85 - 89** відповідає оцінці «добре» («дуже добре»);
- **90 - 100** відповідає оцінці «відмінно».

Шкала відповідності (за умови іспиту)

За 100 – бальною шкалою	За національною шкалою	
90 – 100	5	відмінно
85 – 89	4	добре
75 – 84		
65 – 74	3	задовільно
60 – 64		
35 – 59	2	не задовільно
1 – 34		

ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Змістовий модуль 1

ТЕМА 1. Сучасні напівемпіричні методи та їх особливості. (2 год.)

ТЕМА 2. Програми для виконання квантово-хімічних розрахунків. (2 год.)

ТЕМА 3. Стандартні розрахунки (2 год.)

Змістовий модуль 2

ТЕМА 4. Побудова вихідних органічних молекул та мономерів (2 год.)

ТЕМА 5. Побудова полімерів (2 год.)

ТЕМА 6. Побудова полімеризаційних полімерів. (2 год.)

ТЕМА 7. Побудова поліконденсаційних полімерів (2 год.)

ТЕМА 8. Оптимізація геометрії молекул (2 год.)

Змістовий модуль 3

ТЕМА 9. Розрив молекул (2 год.)

ТЕМА 10. Взаємодія радикалів з мономерами (2 год.)

ТЕМА 11. Взаємодія макрорадикалів з мономером (2 год.)

ТЕМА 12. Вивчення цис-транс ізомеризації (2 год.)

**СТРУКТУРА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ
ТЕМАТИЧНИЙ ПЛАН ЛЕКЦІЙ І СЕМІНАРСЬКИХ ЗАНЯТЬ**

№	Назва лекції	Кількість годин		
		лекції	практ. роботи	сам. робота
Змістовий модуль 1				
1	Сучасні напівемпіричні методи та їх особливості.	2		
2	Програми для виконання квантово хімічних розрахунків.	2		
3	Стандартні розрахунки	2	1	10
Змістовий модуль 2				
4	Побудова вихідних органічних молекул та мономерів	2	1	6
5	Побудова полімерів	3	1	8
6	Побудова полімеризаційних полімерів.	3	1	6
7	Побудова поліконденсаційних полімерів	3	1	6
8	Оптимізація геометрії молекул	4	1	8
Змістовий модуль 3				
9	Розрив молекул	3	1	10
10	Взаємодія радикалів з мономерами	2	1	8
11	Взаємодія макрорадикалів з мономером	2	1	8
12	Вивчення цис-транс ізомеризації	2	1	10
	Всього	30	10	80

Загальний обсяг **120 год.**¹, в тому числі:

Лекцій – **30 год.**

Практичні заняття – **10 год**

Самостійна робота – **80 год.**

¹ Загальна кількість годин, відведених на дану дисципліну згідно навчального плану.

ЗМІСТОВИЙ МОДУЛЬ 1

ТЕМА 1. Сучасні напівемпіричні методи та їх особливості.

(2 год.)

Лекція 1. Сучасні напівемпіричні методи та їх особливості. Метод CNDO. Метод INDO. Метод MINDO. Метод MNDO. Методи AM1 та PM3. Метод SAM1. Метод PM6. Метод RM1. Метод PM7.

Контрольні запитання

1. Пояснити різницю між напівемпіричними методами.
2. Мотивовано навести найбільш точні сучасні напівемпіричні методи

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.

ТЕМА 2. Програми для виконання квантово хімічних розрахунків.

Лекція 2. Сучасні програми для виконання квантово хімічних розрахунків. Програма GAMESS. Програма Gaussian. Програма ArgusLab. Програма HyperChem. Програма ПРИРОДА. Програма CRYSTAL. Програма MOPAC2009. Програма MOPAC2012. Програма MOPAC2016. (2 год.).

Контрольні запитання та завдання

1. Переваги та недоліки існуючих програми для виконання квантово хімічних розрахунків
2. Робота в програмі ArgusLab.
3. Робота в програмі HyperChem.
4. Робота в програмі MOPAC2016.

Рекомендована література

22. Stewart J.J.P. MOPAC 2012 / J.J.P. Stewart. Stewart Computational Chemistry. Colorado Springs, CO. – 2014 Available at <http://openmopac.net>

23. Young D.C. "Appendix A. A.2.3 GAMESS" / D.C. Young // Computational Chemistry: A Practical Guide for Applying Techniques to Real World Problems. Wiley-Interscience. – 2001. - P. 335.

24. Guest M.F. The GAMESS-UK structure package: algorithms, developments and applications / M.F. Guest, I.J. Bush, H.J.J. Van Dam, P. Sherwood, J.M.H. Thomas, J.H. Van Lenthe, R.W.A. Havenith, J. Kendrick // Molecular Physics. – 2005. – V.103 (6–8). – P. 719–747.

25. Granovsky A. Firefly version 8 [Електронний ресурс] / A.A. Granovsky // [www http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html](http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html)
26. Baboul A.G. [Gaussian-3 theory using density functional geometries and zero-point energies](#) / A.G. Baboul, L.A. Curtiss, P.C. Redfern, K. Raghavachari // *J. Chem. Phys.* - 1999. - V. 110. - Fasc. 16. - P. 7650-7657.
27. 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.
28. Curtiss L. [Gaussian-3 and related methods for accurate thermochemistry](#) (англ.) / L.A. Curtiss, K. Raghavachari // *Theor. Chem. Acc.* - 2002. - Fasc. 2. - P. 61-70.

ТЕМА 3. Стандартні розрахунки

Лекція 3. Стандартні розрахунки. Енергія молекули. Геометрія молекули. Енергія і форма молекулярних орбіталей. Заряди на атомах. Розподіл електростатичного потенціалу. Дипольний момент. Оцінка точності напівемпіричного методу. (2 год.).

Контрольні запитання та завдання

1. Визначення повної енергії молекули.
2. Визначення геометричних параметрів молекули.
3. Визначення зарядів на атомах.
4. Визначення дипольного моменту молекули.

Практична робота 3 (1 год.)

Визначити дипольний момент органічної молекули методом RM1.

Самостійна робота (10 годин)

Визначення основних параметрів органічних молекул

Рекомендована література

1. Минкин В.И. Теория строения молекул / В.И. Минкин, Б.Я. Симкин, Р.М. Миняев. - Ростов н/Д: Феникс, 1997. – 560 с.
Кишик А.Н. (Ред.) EXEL 2002. Эффективный самоучитель. ООО «ДиаСофтЮП», М., С.-П., К., 2001, 239 с.
2. Клименко А., Кишик А. Эффективный самоучитель работы на ПК. ООО «ДиаСофтЮП», М., С.-П., К., 2003, 656 с.
3. Пасько В., Колесников А. Самоучитель работы на персональном компьютере. – ВНУ, Киев, 1999. – 624 с.

ЗМІСТОВИЙ МОДУЛЬ 2

Тема 4 Побудова вихідних органічних молекул та мономерів

Лекція 4 (2 год.).

Як будувати вихідні органічні молекули та мономери.

Практична робота 4 (1 год.)

В програмі HyperChem побудувати молекулу бензонітрилу

Контрольні запитання та завдання

1. Розрахунок активаційного бар'єру ізомеризації органічної сполуки
2. Визначення перехідного стану реакції.
3. Вибір меж візуалізації. Інтегрування спектру та види запису інтегральної кривої. Цифрові надписи. Експорт графічного файлу.
4. Фур'є трансформація спектру ЯМР. Фазування спектру. Вибір меж візуалізації. Інтегрування спектру. Цифрові надписи.
5. Програма квантово-хімічних розрахунків "MOPAC". Формат даних стартового файлу.

Тема 5 Побудова полімерів

Лекція 5 Побудова полімерів. Побудова поліпептидів. Побудова молекули трипептиду. Побудова молекули поліпептиду. Побудова молекул нуклеїнових кислот. Побудова фрагменту молекули РНК. Побудова фрагменту молекули ДНК. Побудова полісахаридів. (2 год.).

Практична робота 5 (1 год.)

Побудувати фрагменти кількох різних полісахаридів

Самостійна робота (8 годин)

Побудувати фрагменти молекул визначені викладачем.

Контрольні запитання та завдання

1. Фур'є трансформація спектру ЯМР. Фазування спектру. Вибір меж візуалізації. Інтегрування спектру. Цифрові надписи.
2. Програма квантово-хімічних розрахунків "MOPAC". Формат даних стартового файлу.
3. Оптимізація геометрії методами молекулярної механіки. Напівемпіричні методи оптимізації геометрії.
4. Візуалізація довжин міжатомних зв'язків та зарядів на атомах.

Тема 6. Побудова полімеризаційних полімерів.

Лекція 6 (2 год.).

Побудова полімеризаційних полімерів. Побудова атактичних полімеризаційних полімерів. Побудова розгалужених полімерів. Побудова ізотактичних полімеризаційних полімерів. Побудова синдіотактичних полімеризаційних полімерів.

Практична робота 6 (1 год.)

Контрольні запитання та завдання

1. Розрахунок активаційного бар'єру ізомеризації органічної сполуки
2. Визначення перехідного стану реакції.
3. Розрахунок параметрів S_1 стану молекули та її спектру поглинання.
4. Форми запису графічного файлу. Імпорт та експорт структури.

Тема 7. Побудова поліконденсаційних полімерів

Лекція 7. Побудова поліконденсаційних полімерів. Побудова поліконденсаційних полімерів з мономерів що містять дві різні функціональні групи. Полімери з двох мономерів що містять дві однакові функціональні групи. Побудова полімерів для подальших розрахунків (2 год.).

Практична робота 7 (1 год.)

Самостійна робота (6 годин)

Побудувати

Контрольні запитання та завдання

1. Розрахунок активаційного бар'єру ізомеризації органічної сполуки
2. Програма квантово-хімічних розрахунків "MORAS". Формат даних стартового файлу.
3. Оптимізація геометрії методами молекулярної механіки. Напівемпіричні методи оптимізації геометрії.
4. Візуалізація довжин міжатомних зв'язків та зарядів на атомах.
5. Форми запису графічного файлу. Імпорт та експорт структури.

Тема 8. Оптимізація геометрії молекул

Лекція 8 (2 год.). Оптимізація геометрії методами молекулярної механіки. Попередня оптимізація геометрії органічних сполук. Знаходження конформеру з найменшою енергією з можливих. Оптимізація геометрії великих молекул. Фінальна оптимізація геометрії органічних сполук. Перевірка оптимізованої структури на наявність мінімуму енергії.

Практична робота 8 (1 год.)

Оптимізація геометрії органічних молекул методами молекулярної механіки

Завдання для самостійної роботи (8 год.)

Оптимізація геометрії методами молекулярної механіки. Вимірювання відстаней, плоских та двогранних кутів між атомами для кополімерів стирол-акрилонітрил, стирол-метилметакрилат та стирол-вінілпіролідон у співвідношенні 1-9, 9-1, 5-5, 2-3 та 3-2 для кожного кополімеру відповідно.

Контрольні запитання та завдання

1. Визначення перехідного стану реакції.
2. Вибір меж візуалізації. Інтегрування спектру та види запису інтегральної кривої. Цифрові надписи. Експорт графічного файлу.
3. Оптимізація геометрії методами молекулярної механіки. Напівемпіричні методи оптимізації геометрії.
4. Візуалізація довжин міжатомних зв'язків та зарядів на атомах.
5. Розрахунок параметрів S_1 стану молекули та її спектру поглинання.

ЗМІСТОВИЙ МОДУЛЬ 3

Тема 9. Розрив молекул

Лекція 9

Розрив молекул. Вивчення розкладу ініціаторів. Розклад зі стану S_0 . Розклад зі стану S_1 . Розклад зі стану T_1 . (2 год.).

Практична робота 9 (1 год.)

Розклад фотоініціатору.

Завдання для самостійної роботи (10 год.)

Провести розрахунок розкладу ініціатору зі станів S_0 , S_1 , та T_1 та побудувати відповідні графічні залежності

Контрольні запитання та завдання

1. Розрахунок активаційного бар'єру ізомеризації органічної сполуки
2. Визначення перехідного стану реакції.
3. Вибір меж візуалізації. Інтегрування спектру та види запису інтегральної кривої. Цифрові надписи. Експорт графічного файлу.
4. Оптимізація геометрії методами молекулярної механіки. Напівемпіричні методи оптимізації геометрії.
5. Візуалізація довжин міжатомних зв'язків та зарядів на атомах.

Тема 10. Взаємодія радикалів з мономерами

Лекція 10

Взаємодія радикалів з мономерами (2 год.).

Практична робота 10 (1 год.)

Провести розрахунок взаємодії радикалу з вініловим мономером.

Контрольні запитання та завдання

1. Вибір меж візуалізації. Інтегрування спектру та види запису інтегральної кривої. Цифрові надписи. Експорт графічного файлу.
2. Фур'є трансформація спектру ЯМР. Фазування спектру. Вибір меж візуалізації. Інтегрування спектру. Цифрові надписи.
3. Візуалізація довжин міжатомних зв'язків та зарядів на атомах.
4. Вимірювання відстаней, плоских та двограних кутів між атомами.

Тема 11. Взаємодія макрорадикалів з мономером

Лекція 11

Взаємодія макрорадикалів з мономером. (2 год.).

Практична робота 11 (1 год.)

Розшифровка спектру даної сполуки в програмі ADVASP, розрахунок вмісту (%) домішок.

Завдання для самостійної роботи (8 год.)

Контрольні запитання та завдання

1. Програма квантово-хімічних розрахунків “МОРАС”. Формат даних стартового файлу.
2. Оптимізація геометрії методами молекулярної механіки. Напівемпіричні методи оптимізації геометрії.
3. Візуалізація довжин міжатомних зв’язків та зарядів на атомах.
4. Вимірювання відстаней, плоских та двограних кутів між атомами.

Тема 12. Вивчення цис-транс ізомеризації

Лекція 12

Вивчення цис-транс ізомеризації (2 год.).

Контрольні запитання та завдання

1. Розрахунок активаційного бар’єру ізомеризації органічної сполуки
2. Визначення перехідного стану реакції.
3. Вибір меж візуалізації. Інтегрування спектру та види запису інтегральної кривої. Цифрові надписи. Експорт графічного файлу.
4. Фур’є трансформація спектру ЯМР. Фазування спектру. Вибір меж візуалізації. Інтегрування спектру. Цифрові надписи.
5. Програма квантово-хімічних розрахунків “МОРАС”. Формат даних стартового файлу.

Рекомендована література

30. Thompson, M.A. QM/MMpol: A Consistent Model for Solute/Solvent Polarization. Application to the Aqueous Solvation and Spectroscopy of Formaldehyde, Acetaldehyde, and Acetone / M. A. Thompson // J. Phys. Chem. – 1996. – V. 100. – P. 14492-14507.
31. Young D.C. Appendix A. A.2.2 Crystal / D.C. Young, //Computational Chemistry. Wiley-Interscience. - 2001. - P. 334.
32. Darrigan C. Implementation of the finite field perturbation method in the CRYSTAL program for calculating the [dielectric constant](#) of periodic systems / C. Darrigan, M. Rerat, G. Mallia, R. Dovesi // J. Comp. Chem. – 2003. – V.24. – P. 1305–1312.
33. Stewart J.J.P. Mopac2009, Version 9.189W, Stewart computational chemistry, Colorado Springs, CO 2009. Available at <http://openmopac.net>
34. Stewart J.J.P. MOPAC 2007, Version 7, 290W / J.J.P. Stewart Stewart Computational Chemistry, Colorado Springs, 2007. Available at <http://openmopac.net>
35. Минкин В.И. Теория строения молекул / В.И. Минкин, Б.Я. Симкин, Р.М. Миняев. - Ростов н/Д: Феникс, 1997. – 560 с.
36. Соловьев М.Е. Квантово-химическое исследование разрушения молекул аналогов звеньев бутадиен-стирольного сополимера при растяжении за концевые атомы / М.Е. Соловьев, И.В. Шумилов, В.С. Шарунов // Высокомолекулярные соединения. - 2008. - Серия А. - Т. 50. - № 3. - С. 510–

517.

37. Ошкин И.В. Квантово-химические исследования фотоактивных азагетероароматических соединений: автореф. дис... канд. наук / Москва. – 2010. – 23 с.

38. Универсальная научно-популярная онлайн-энциклопедия Кругосвет, Фотохимические реакции [Электронный ресурс]:

http://www.krugosvet.ru/enc/nauka_i_tehnika/himiya/fotohimicheskie_reaktsii.html?page=0,1

1.