

НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ

ВІДДІЛЕННЯ ФІЗИКО-ХІМІЇ ГОРЮЧИХ КОПАЛИН
ІНСТИТУТУ ФІЗИКО-ОРГАНІЧНОЇ ХІМІЇ І ВУГЛЕХІМІЇ ім. Л. М.
ЛИТВИНЕНКА

«ЗАТВЕРДЖУЮ»

Директор Відділення ФХГК ІнФОВ

ім. Л. М. Литвиненка НАН України

С. Н. С., К. Х. Н.

Г. Г. МІДЯНА



«20» грудня 2019 р.

СИЛАБУС З ДИСЦИПЛІНИ

«Сучасні квантово-хімічні методи дослідження»

ГАЛУЗЬ ЗНАНЬ
СПЕЦІАЛЬНІСТЬ
СПЕЦІАЛІЗАЦІЯ
РІВЕНЬ ОСВІТИ

10 – ПРИРОДНИЧІ НАУКИ
102 – «ХІМІЯ»
«ФІЗИЧНА ХІМІЯ»
ТРЕТІЙ (ОСВІТНЬО-НАУКОВИЙ)

Львів – 2019

Силабус навчальної дисципліни «Сучасні квантово-хімічні методи дослідження» для аспірантів в галузі знань 10 – «Природничі науки», спеціальності 102 – «Хімія» (спеціалізації «Фізична хімія») (третьій освітньо-науковий рівень освіти).

«20» грудня 2019 р. – 8 с.

Розробник: Дутка В. С., д. х. н., професор,
 доцент кафедри фізичної та колоїдної хімії
 Львівського національного університету імені Івана Франка

Силабус затверджено на засіданні вченої ради Відділення фізико-хімії горючих копалин Інституту фізико-органічної хімії і вуглехімії ім. Л. М. Литвиненка НАН України (протокол № 17 від «20» грудня 2019 року).

© Дутка В. С. 2019

Назва курсу	СУЧАСНІ КВАНТОВО-ХІМІЧНІ МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ
Адреса викладання курсу	Наукова лабораторія Відділення фізико-хімії горючих копалин Інституту фізико-органічної хімії і вуглехімії ім. Л. М. Литвиненка НАН України; вул. Наукова, 3а, кімн. № 146
Відділ, за яким закріплена дисципліна	Відділ хімії окислювальних процесів
Галузь знань, шифр та назва спеціальності	10 Природничі науки 102 Хімія
Викладачі курсу	Дутка Володимир Степанович, д. х. н., проф., доцент кафедри фізичної і колоїдної хімії Львівського національного університету імені Івана Франка; старший науковий співробітник (за сумісництвом) відділу хімії окислювальних процесів Відділення ФХГК ІнФОВ НАН України
Контактна інформація викладачів	Відділ хімії окислювальних процесів, вул. Наукова, 3а, кімн. № 146; (032) 263 5174 електронна пошта: vdutka@ukr.net
Консультації по курсу відбуваються	1) очно при попередній домовленості з викладачем за адресою: Відділ хімії окислювальних процесів, вул. Наукова, 3а, кімн. № 146; 2) заочно через електронну пошту
Інформація про курс	«Сучасні квантово-хімічні методи дослідження» є обов'язковим для вивчення компонентом освітньо-наукової програми підготовки доктора філософії за спеціальністю 102 «Хімія». Обсяг дисципліни – 90 годин (3 кредити ECTS), в тому числі аудиторних – 30 годин для денної та 15 годин для заочної форми навчання
Коротка анотація курсу	В зв'язку з стрімким розвитком комп'ютерної техніки в світі, курс «Сучасні квантово-хімічні методи дослідження» спрямований на підготовку спеціалістів-хіміків, які ґрунтовно оволоділи знаннями теоретичних основ квантової хімії, вільно орієнтуються в сучасному інформаційному просторі та вміють застосовувати сучасні програми квантово-хімічного моделювання для вирішення поточних хімічних проблем.

<p>Мета та цілі курсу</p>	<p>Метою курсу «Сучасні квантово-хімічні методи дослідження» є формування необхідного теоретичного базису в галузі квантової хімії, надання здобувачу знань щодо сучасних квантово-хімічних методів дослідження та застосування програм для квантово-хімічних розрахунків для проведення наукових досліджень.</p>
<p>Література для вивчення дисципліни</p>	<p>Базова</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Ковальчук Є. П. Основи квантової хімії. К. 1996. с.308. 2. Стрижак П. Є. Квантова хімія. К. «Києво-Могилянська академія, 2009, с.458. 3. Вакарчук І. О. Квантова механіка. Львів. 2007. с.848. 4. Фларри Р. Квантовая химия. М.: Мир. 1985. с. 472. 5. Яцимирський К. Б., Яцимирский В. К. Хімічний зв'язок. К. Вища школа. 1992. с. 246. 6. Туровський М. А., Туровська О. М. Практичний курс комп'ютерної структурної хімії. Донецьк. 2004. с.131. 7. Венгер Є. Ф., Грибань В. М., Мельничук О. В. Збірник задач з квантової механіки. К. Вища школа, 2003 с. 230. 8. Минкин В. И., Симкин Б. Я., Миняев Р. М. Теория строения молекул. М.: Высшая школа. 1979, с.407. <p>Допоміжна:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Заградник Р., Поллак Р. Основы квантовой химии. М.: Мир. 1979. с.504. 2. Давыдов А. С. Квантовая механика. М.: Наука 1973. с. 848. 3. Флайгер И. Строение и динамика молекул. В 2-х т. М.: Мир 1982. с.472. 4. Piela L. Idee chemii kwantowej. Warszawa. Wyd. PWN. 2006. p. 1137. 5. Frank L. Pilar. Elementary Quantum Chemistry. Nj. 1990. p.589. 6. http://openmopac.net/manual/
<p>Тривалість курсу</p>	<p>II рік підготовки, 3 семестр 90 годин</p>

<p>Очікувані результати навчання</p>	<p>В результаті вивчення навчального матеріалу аспірант повинен знати:</p> <ul style="list-style-type: none"> • основні закони квантової механіки; • теоретичні засади методів квантово-хімічних розрахунків оптимальної геометричної структури і електронних характеристик молекул; <p>вміти:</p> <ul style="list-style-type: none"> • застосовувати сучасні методи квантово-хімічного моделювання для оптимізації геометрії та електронних характеристик речовин; • аналізувати отримані з використанням сучасних програм для квантово-хімічних розрахунків результати та використовувати їх для прогнозування структури молекул та іонів та їх реакційної здатності.
<p>Формат курсу</p>	<p>Очний / заочний. Лекційні та семінарські заняття, проведення консультацій у випадку труднощів із засвоєнням матеріалу</p>
<p>Теми</p>	<p>ТЕМА 1. Вступ. Завдання та предмет курсу «Сучасні квантово-хімічні методи дослідження».</p> <p>ТЕМА 2. Базові уявлення про квантово-хімічні моделі. Рівняння <i>Гартрі-Фока</i>. Електронна кореляція.</p> <p>ТЕМА 3. Теоретичні засади напівемпіричних методів квантово-хімічних розрахунків.</p> <p>ТЕМА 4. Теоретичні і практичні засади методів <i>ab initio</i>. Теорія наближених молекулярних орбіталей.</p> <p>ТЕМА 5. Молекулярна механіка.</p> <p>Тема 6. Програми для розрахунку геометрії молекул методами молекулярної механіки.</p> <p>ТЕМА 7. Теорія молекулярних орбіталей.</p> <p>ТЕМА 8. Розрахунок термодинамічних властивостей молекул.</p> <p>ТЕМА 9. Аналіз результатів розрахунків методом молекулярного моделювання та виключення помилок.</p> <p>ТЕМА 10. Молекулярна динаміка простих систем та її комп'ютерне моделювання.</p> <p>ТЕМА 11. Перехідний стан. Розрахунок параметрів перехідного стану. Врахування впливу середовища в молекулярній динаміці.</p> <p>ТЕМА 12. Сольватація. Прості сольватаційні моделі. Молекулярне моделювання при обчисленні вільних енергій сольватації.</p>

<p>Теми</p>	<p>ТЕМА 13. Аналіз не електростатичних вкладів до значень вільних енергій молекул. Молекулярне моделювання як метод відкриття нових молекул. ТЕМА 14. Використання квантово-хімічного моделювання при розробці лікарських препаратів. ТЕМА 15. Огляд програм MOPAC та Avogadro для проведення та представлення результатів квантово-хімічних розрахунків напівемпіричними методами. ТЕМА 16. Неемпіричні методи розрахунків. Програми GAUSSIAN та GAMES.</p>
<p>Підсумковий контроль, форма</p>	<p>Усний іспит</p>
<p>Необхідне обладнання</p>	<p>Для повноцінного забезпечення читання лекцій і проведення практичних занять використовуються технічні засоби навчання, зокрема персональні комп'ютери, мультимедійний проектор Epson EB-1900, екран стаціонарний механізований, WiFi-роутер (для підключення до Інтернету та спільної роботи).</p>
<p>Навчальні методи та техніки, які будуть використовуватися під час викладання дисципліни</p>	<ul style="list-style-type: none"> – інформаційно-ілюстративний метод; – метод проблемного викладу; – метод вправ, спостереження і аналізу; – метод бесіди; – методи інтерактивного навчання (ділові ігри, круглі столи, тощо); – блоковий метод; – метод проектів; – використання комп'ютерних технологій.

**Критерії оцінювання навчальних досягнень аспірантів з дисципліни
«Сучасні квантово-хімічні методи дослідження»**

Рівень, шкала ECTS, бали	Теоретична підготовка	Практичні вміння і навички
1	2	3
Високий, А, 91* – 100, відмінно – 5	Аспірант має глибокі, міцні і систематичні знання всіх положень наукової методології, може не тільки вільно володіти матеріалом, але й самостійно довести існування певних закономірностей, принципів, використовує здобуті знання і вміння в нестандартних ситуаціях, здатний вирішувати проблемні питання. Відповідь аспіранта відрізняється точністю формулювань, логікою, достатній рівень узагальненості знань	Аспірант самостійно розв'язує типові ситуаційні задачі різними способами, стандартні, комбіновані й нестандартні казуси з наукової методології, здатний проаналізувати й узагальнити отриманий результат. При виконанні індивідуальних завдань та самостійних робіт аспірант дотримується усіх вимог, передбачених програмою курсу. Крім того, його дії відрізняються раціональністю, вмінням оцінювати помилки й аналізувати результати
Вище середнього, Середній В, С, 81 – 90; 71 – 80; дуже добре, добре – 4	Аспірант знає і може самостійно сформулювати основні методологічні підходи, принципи їх застосування, але не завжди може самостійно здійснити критичний аналіз. Аспірант може самостійно застосовувати знання в стандартних ситуаціях, його відповідь логічна, але розуміння не є узагальненим	Аспірант самостійно розв'язує типові (або за визначеним алгоритмом) казуси з наукової методології і завдання, володіє базовими навичками з виконання необхідних логічних операцій та перетворень, може самостійно сформулювати типову задачу за її словесним описом, скласти типову схему та обрати раціональний метод розв'язання, але не завжди здатний провести аналіз і узагальнення результату
Достатній, D, E, 61 – 70, 51 – 60 задовільно, посередньо – 3	Аспірант відтворює основні поняття і визначення курсу, але досить поверхово, не виділяючи взаємозв'язок між ними, може сформулювати з допомогою викладача основні методологічні положення, знає істотні ознаки (засади) основних підходів та їх відмінність, може записати окремі термінологічні дефініції теоретичного положення за словесним формулюванням і навпаки; допускає помилки, які повною мірою самостійно виправити не може	Аспірант може розв'язати найпростіші типові задачі за зразком, виявляє здатність виконувати основний елементарний аналіз конкретних наукових методів, але не спроможний самостійно сформулювати задачу за словесним описом і визначити метод її розв'язання. При вирішенні фабули аспірант виконує роботу за зразком, але з помилками; робить висновки, але не розуміє достатньою мірою мету роботи

<p>Низький, FX / F 1 – 51, незадовільно – 2</p>	<p>Відповідь аспіранта при відтворенні навчального матеріалу елементарна, фрагментарна, зумовлена нечіткими уявленнями про закони і методи. У відповіді цілком відсутня самостійність. Аспірант знайомий лише з деякими основними поняттями та визначеннями курсу, з допомогою викладача може сформулювати лише деякі основні положення теорії (рис, принципи)</p>	<p>Аспірант знає основні терміни та вміє розрізняти окремі закономірності. Вміє розв'язувати задачі лише на відтворення основних положень методології, здійснювати найпростіші логічні операції. При вирішенні фабули аспірант вміє користуватися окремими методологічними підходами, але не може самостійно виконати роботу і зробити висновки</p>
--	--	---

Примітка:

*Відповіді, оцінені до 90 балів, можуть супроводжуватися додатковими питаннями – до 10 балів у сукупності.

Розподіл балів, що виставляються аспірантам (ПМК – I семестр)

Модуль I				Модуль II				Самостійна робота	Сума	
Поточний контроль Теми 1–4				Підсумковий контроль Теми 1–4	Поточний контроль Теми 5–7					Підсумковий контроль Теми 5–7
Тема 1	Тема 2	Тема 3	Тема 4		Тема 1	Тема 2	Тема 3			
5	5	5	5	10	5	5	5	25	30	100

**Шкала переведення академічних успіхів аспірантів
Відділення ФХГК ІнФОВ ім. Л. М. Литвиненка НАН України
в шкалу за системою ECTS**

Шкала оцінювання					
Оцінювання за національною шкалою		Оцінювання за шкалою ЄКТС			
Іспит	Залік	Інтервал за шкалою		Оцінювання згідно з ЄКТС	
		накопичувальної системи			
відмінно	зараховано	90–100		A	відмінно
добре		82–89		B	дуже добре
		74–81		C	добре
задовільно		64–73		D	задовільно
		60–63		E	достатньо
незадовільно	не зараховано	35–39		FX	незадовільно
		1–34		F	неприйнятно