


МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ  
Львівський національний університет імені Івана Франка  
Хімічний факультет  
Кафедра фізичної та колоїдної хімії

ЗАТВЕРДЖЕНО  
на засіданні кафедри фізичної та колоїдної  
хімії хімічного факультету  
Львівського національного університету імені  
Івана Франка  
(протокол № 14 від 7 лютого 2020 р.)  
Завідувач кафедри  О. В. Решетняк

Силабус з навчальної дисципліни  
**«СУЧАСНІ КВАНТОВО-ХІМІЧНІ МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ»**,  
що викладається в межах третього (освітньо-наукового) рівня  
вищої освіти для здобувачів з спеціальності  
102 ХІМІЯ

Львів 2020 р.

<b>Назва курсу</b>	<b>Сучасні квантово-хімічні методи дослідження</b>
<b>Адреса викладання курсу</b>	Навчальний корпус по вул..Кирила і Мефодія 6.
<b>Факультет та кафедра, за якою закріплена дисципліна</b>	Хімічний факультет, кафедра фізичної та колоїдної хімії
<b>Галузь знань, шифр та назва спеціальності</b>	10 Природничі науки, 102 Хімія
<b>Викладачі курсу</b>	Дутка Володимир Степанович, професор
<b>Контактна інформація викладачів</b>	<a href="mailto:vdutka@ukr.net">vdutka@ukr.net</a>
<b>Консультації по курсу відбуваються</b>	Щочетверга 11:00-12:30 год. (Кирила і Мефодія 6, хімічний факультет, ауд. 122)
<b>Сторінка курсу</b>	<a href="https://chem.lnu.edu.ua/academics/postgraduates">https://chem.lnu.edu.ua/academics/postgraduates</a>
<b>Інформація про курс</b>	Курс «Сучасні квантово-хімічні методи дослідження» розроблено для студентів-аспірантів з спеціалізації «Фізична хімія» і має на меті надати аспіранту необхідні знання з сучасних квантово-хімічних методів для успішного їх використання у наукових дослідженнях. Студенти-аспіранти матимуть змогу закріпити набуті в магістратурі знання та освоїти нові квантово-хімічні програми для розрахунку оптимальної геометричної будови, фізико-хімічних параметрів та прогнозувати реакційну здатність досліджуваних сполук
<b>Коротка анотація курсу</b>	Курс «Сучасні квантово-хімічні методи дослідження» відноситься до розділу «Теоретична хімія» і призначена для аспірантів. На сьогодні методи квантової хімії широко впроваджуються як в теоретичні так і в практичні дослідження практично у всіх галузях хімічної науки. Методи квантової хімії широко використовуються в багатьох сучасних наукових дослідженнях. На практиці, за рахунок квантово-хімічних досліджень, можна отримати багато фізико-хімічних параметрів як от: теплоти утворення речовин, дипольні моменти, потенціали іонізації, енергію вищої занятої та нижчої вакантної орбіталей. Одержані параметри дозволяють розраховувати теплові ефекти хімічних процесів, прогнозувати реакційну здатність досліджуваних сполук та їхні окиснювально-відновні властивості. Методи квантово-хімічного молекулярного моделювання дають змогу визначити оптимальну геометричну будову молекул та проміжних часточок в реакціях. Сучасні розрахункові методи квантової хімії дають змогу розраховувати УФ- та ІЧ-спектри досліджуваних молекул та порівнювати їх з практичними результатами. Застосовуючи теоретичні розрахунки можна обчислювати енергії активації та термодинамічні параметри багатьох процесів. Освоївши курс «Сучасні квантово-хімічні методи дослідження» аспіранти можуть застосовувати методи квантової хімії для вирішення багатьох завдань, які стоять перед ними при виконанні дисертаційної роботи.

<b>Мета та цілі курсу</b>	Метою викладання навчальної дисципліни «Сучасні квантово-хімічні методи дослідження» є поглиблене вивчення законів квантової механіки та використання цих законів для розрахунку різних молекул, шляхів перетворення молекул в хімічних реакціях, обчислення теплот утворення, дипольних моментів, реакційної здатності різних сполук. В ході вивчення дисципліни аспірант повинен освоїти сучасні квантово-хімічні програми і вміти їх застосовувати для вирішення тих проблем, які виникають при виконанні дисертаційної роботи.
<b>Література для вивчення дисципліни</b>	<p><b>ПЕРЕЛІК РЕКОМЕНДОВАНИХ ПІДРУЧНИКІВ, МЕТОДИЧНИХ ТА ДИДАКТИЧНИХ МАТЕРІАЛІВ</b></p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Слета Л.О., Іванов В.В. Квантова хімія Харків. «Гімназія» 2008. с.443.</li> <li>3. Стрижак П.Є. Квантова хімія. К. «Києво-Могилянська академія, 2009, с.458.</li> <li>3. Leach A.R. Molecular modeling. Longman. 1996. 596 p.</li> <li>4. Вакарчук І.О. Квантова механіка. Львів. 2007. с.848.</li> <li>5. Фларри Р. Квантовая химия. М.: Мир. 1985. с. 472.</li> <li>6. Яцимирський К.Б., Яцимирский В.К. Хімічний зв'язок. К. Вища школа. 1992. с. 246.</li> <li>7. Туровський М.А., Туровська О.М. Практичний курс комп'ютерної структурної хімії. Донецьк. 2004. с.131.</li> <li>8. Венгер Є.Ф., Грибань В.М., Мельничук О.В. Збірник задач з квантової механіки. К. Вища школа, 2003 с. 230.</li> <li>9. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Теория строения молекул. М.: Высшая школа. 1979, с.407.</li> <li>10. Степанов Н.Ф. Квантовая механика и квантовая химия. М.: Мир 2001. 518 с.</li> <li>11. Барановский В.И. Квантовая механика и квантовая химия. М.: Академия 2008. 383 с.</li> <li>12. Fleming Jan Molecular Orbitals and Organic chemical Reaction. 2010. 515</li> <li>13. Jensen Frank Introduction to Computation chemistry. Wiley. 2007. 599.</li> <li>14. Nguen Trong Anh. Frontier orbitals. A practical manual. Wiley. 2007. 304.</li> </ol> <p style="text-align: center;"><b>Додаткова література</b></p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Заградник Р., Поллак Р. Основы квантовой химии. М.: Мир. 1979. с.504.</li> <li>2. Давыдов А.С. Квантовая механика. М.: Наука 1973. с. 848.</li> <li>3. Флайгер И. Строение и динамика молекул. В 2-х т. М.: Мир 1982. с.472.</li> <li>4. Piela L. Idee chemii kwantowej. Warszawa. Wyd. PWN. 2006. p. 1137.</li> <li>5. Frank L. Pilar. Elementary Quantum Chemistry. Nj. 1990. p.589.</li> <li>6. Краснов К.С. Молекулы и химическая связь. М.: Высшая школа. 1977. с.280.</li> </ol>
<b>Тривалість курсу</b>	90 годин
<b>Обсяг курсу</b>	32 год. лекції, 16 год. практичні заняття, самостійна робота 42 год. (очна форма навчання); 12 год. лекції, 6 год. практичні заняття, самостійна робота 72 год. (заочна форма навчання).
<b>Очікувані результати навчання</b>	Після завершення цього курсу аспірант буде : <b>Знати:</b> -основні закони квантової механіки; -наближені методи розв'язку рівнянь Шрьодінгера;

	<p>-методи квантово-хімічних розрахунків оптимальної геометричної структури, -електронних характеристик молекул;  -основні напівемпіричні методи квантово-хімічних розрахунків;  -методи квантово-хімічних розрахунків ab initio</p> <p>-сучасні квантово-хімічні програми для розрахунку властивостей</p> <p>- <b>Вміти:</b></p> <p>- на основі квантово-хімічних методів розраховувати реакційну здатність молекул</p> <p>- інтерпретувати результати квантово-хімічних розрахунків;</p> <p>- прогнозувати електронні властивості атомів та молекул;</p> <p>- прогнозувати структуру молекул та іонів;</p> <p>- прогнозувати реакційну здатність молекул та іонів.</p> <p>-розраховувати теоретичні ІЧ та УФ- спектри досліджуваних молекул</p> <p>-розраховувати параметри перехідного стану та шляхи перетворення молекул</p>
<b>Ключові слова</b>	Квантова хімія, розрахунки, реакційна здатність, оптимальна будова молекул
<b>Формат курсу</b>	Очний/заочний
	Проведення консультації для кращого розуміння теми
<b>Теми</b>	<p><b>Семестр 3.</b></p> <p><b>Тема 1. Вступ.</b> Завдання та предмет курсу «Сучасні квантово-хімічні методи дослідження» Основні досягнення та проблеми квантово-хімічних розрахунків. Обчислення структури та енергії молекул.</p> <p><b>Тема 2.</b> Квантово-хімічні моделі. Багатоелектронні атоми моделі атомів. Рівняння Гартрі-Фока. Електронна кореляція.</p> <p><b>Тема 3.</b> Напівемпіричні методи квантово-хімічних розрахунків. Теоретичні засади. Метод орбіталей Гюккеля.</p> <p><b>Тема 4.</b> Практичні засади застосування розрахункових методів ab initio. Теорія наближених молекулярних орбіталей.</p> <p><b>Тема 5.</b> Молекулярна механіка. Модель силового поля. Можливості та обмеження моделі силового поля для розрахунку параметрів молекул.</p> <p><b>Тема 6.</b> Прикладні програми для розрахунку молекул методами молекулярної механіки. Розрахунок термодинамічних параметрів з використанням теорії силового поля.</p> <p><b>Тема 7.</b> Теорія молекулярних орбіталей. Геометрія молекули z- матриця. Оптимізація геометрії. Мінімізація енергії. Визначення перехідних структур та шляхів реакції.</p> <p><b>Тема 8.</b> Комп'ютерне моделювання. Розрахунок простих термодинамічних властивостей. Практичні аспекти комп'ютерного моделювання.</p> <p><b>Тема 9.</b> Аналіз отриманих результатів методом молекулярного моделювання та виключення помилок.</p> <p><b>Тема 10.</b> Комп'ютерне моделювання молекулярної динаміки. Молекулярна динаміка простих систем Постановка задачі та особливості розрахунків складних систем.</p> <p><b>Тема 11.</b> Розрахунок констант перехідного стану. Врахування ефектів середовища в молекулярній динаміці. Конформаційний аналіз.</p> <p><b>Тема 12.</b> Молекулярне моделювання в обчисленні вільних енергій та</p>

	<p>сольватації. Розрахунок ентальпій та ентропії. Прості сольватаційні моделі. Електростатичний вклад до вільних енергій сольватації модель Борна-Онзагера.</p> <p><b>Тема 13</b> Не електростатичні вклади до вільних енергій. Використання молекулярного моделювання для відкриття нових молекул.</p> <p><b>Тема 14.</b> Молекулярне моделювання у відкритті ліків. Кількісні відношення структура – активність.</p> <p><b>Тема 15.</b> Напівемпіричні методи Програма МОРПАК. Можливості програми та межі застосування.</p> <p><b>Тема 16.</b> Не емпіричні методи розрахунків. Програми серії GAUSSIAN та GAMES. Можливості програм та межі застосування.</p>				
<b>Підсумковий контроль, форма</b>	<b>екзамен в кінці курсу</b>				
	<b>Оцінювання підготовленості студентів-аспірантів.</b>				
	<b>№ з/п</b>	<b>Види розрахункових робіт</b>	<b>Лабораторна</b>	<b>Форма звітності</b>	<b>Сума балів</b>
	1	Розрахунок оптимальної геометричної будови молекул		Звіт за роботу	5,0
	2	Розрахунок міжядерних віддалей, плоских та дієдральних кутів. Побудова Z-матриць		Звіт за роботу	5,0
	3	Розрахунок фізико-хімічних параметрів та їх порівняння з експериментальними даними.		Звіт за роботу	5,0
	4	Розрахунок теплот реакції та порівнянні отриманих даних з базою даних NIST		Звіт за роботу	5,0
	5	Робота з програмою Hyperchem		Звіт за роботу	5,0
	6	Розрахунок напівемпіричними методами УФ- та ІЧ-спектрів		Звіт за роботу	5,0
	<b>Максимальна сума балів за виконання робіт 30 балів</b>				
	<b>Оцінювання теоретичної підготовленості студентів-аспірантів</b>				
	<b>№ з/п</b>	<b>Лекційні опитування</b>		<b>Сума балів</b>	
	1	Основи квантової механіки. Основні оператори квантової механіки		2,0	
	2	Рівняння Шрьодінгера для різних квантово-хімічних моделей.		2,0	
	3	Розв'язок рівняння Шрьодінгера для атома водню. Типи атомних орбітолей.		2,0	
	4	Детермінант Слейтера. Властивості детермінанта. Кулонівський інтеграл.		2,0	
	5	Рівняння Рутаана. Обмінний інтеграл. Методи розрахунку молекул.		2,0	
	<b>Максимальна сума балів при лекційному опитуванні – 10 балів</b>				

	<p>Для допуску до екзамену аспіранти проходять тестування в системі MUDLL з предмету «Квантова механіка та квантова хімія» максимальна сума балів, яку можуть набрати за цей вид роботи - 10,0 балів</p> <p>Отже за виконання розрахункових робіт, лекційні опитування та тестування аспірант може набрати 50 балів і буде допущений до іспиту.</p>
<b>Пререквізити</b>	Для вивчення курсу студенти потребують базових знань з вищої математики, фізики, фізичної хімії, квантової механіки. Ці дисципліни, достатні для сприйняття категоріального апарату курсу «Сучасні квантово-хімічні методи дослідження», та розуміння сучасної літератури з квантової хімії.
<b>Навчальні методи та техніки, які будуть використовуватися під час викладання курсу</b>	Презентація, лекції, розрахункові роботи в комп'ютерному класі (форми – індивідуальні проекти).
<b>Необхідне обладнання</b>	Із урахуванням особливостей навчальної необхідне використання проекційної установки. Вивчення курсу потребує використання сучасних квантово-хімічних програм, як от: WINMOPAC 2016, HYPRECHEM, WINMOSTAR та інше програмне забезпечення, крім загально вживаних програм і операційних систем.
<b>Критерії оцінювання (окремо для кожного виду навчальної діяльності)</b>	<p>Оцінювання проводиться за 100-бальною шкалою. Бали нараховуються за наступним співвідношенням:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• практичні розрахункові роботи до 30 % семестрової оцінки; максимальна кількість балів 30</li> <li>• контрольні заміри на лекційному опитуванні: 10 % семестрової оцінки; максимальна кількість балів 10.</li> <li>• проведення тестування в системі MOODLE до 10 % семестрової оцінки, максимальна кількість балів 10.</li> <li>• іспит: 50% семестрової оцінки. Максимальна кількість балів 50</li> </ul> <p>Підсумкова максимальна кількість балів 100</p> <p><b>Академічна доброчесність:</b> Очікується, що роботи студентів будуть їх оригінальними дослідженнями чи міркуваннями. Відсутність посилань на використані джерела, фабрикування джерел, списування, втручання в роботу інших студентів становлять, але не обмежують, приклади можливої академічної недоброчесності. Виявлення ознак академічної недоброчесності в письмовій роботі студента є підставою для її незарахування викладачем, незалежно від масштабів плагіату чи обману. <b>Відвідання занять</b> є важливою складовою навчання. Очікується, що всі студенти відвідають усі лекції і практичні заняття курсу. Студенти мають інформувати викладача про неможливість відвідати заняття. У будь-якому випадку студенти зобов'язані дотримуватися усіх строків визначених для виконання усіх видів письмових робіт, передбачених курсом. <b>Література.</b> Уся література, яку студенти не</p>

	<p>зможуть знайти самостійно, буде надана викладачем виключно в освітніх цілях без права її передачі третім особам. Студенти заохочуються до використання також й іншої літератури та джерел, яких немає серед рекомендованих.</p> <p><b>Політика виставлення балів.</b> Враховуються бали набрані на поточному тестуванні, самостійній роботі та бали підсумкового тестування. При цьому обов'язково враховуються присутність на заняттях та активність студента під час практичного заняття; недопустимість пропусків та запізнь на заняття; користування мобільним телефоном, планшетом чи іншими мобільними пристроями під час заняття в цілях не пов'язаних з навчанням; списування та плагіат; несвоєчасне виконання поставленого завдання і т. ін.</p> <p>Жодні форми порушення академічної доброчесності не толеруються.</p>
<b>Питання до заліку чи екзамену.</b>	Перелік питань буде надано пізніше
<b>Опитування</b>	Анкету-оцінку з метою оцінювання якості курсу буде надано по завершенню курсу.