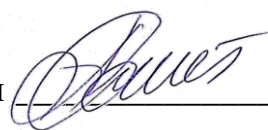


МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
Львівський національний університет імені Івана Франка
Факультет: хімічний
Кафедра фізичної та колоїдної хімії

“ЗАТВЕРДЖЕНО”
на засіданні кафедри фізичної та колоїдної хімії хімічного факультету
Львівського національного університету імені Івана Франка
(протокол № 1_ від 31 серпня 2022 р.)

Завідувач кафедри



Олександр РЕШЕТНЯК

Силабус з навчальної дисципліни

“Молекулярне моделювання: теоретичні та практичні аспекти”,
що викладається в межах ОПП «Хімія» другого (магістерського) рівня вищої
освіти для здобувачів з спеціальності 102 Хімія

Львів 2022

Назва курсу	Молекулярне моделювання: теоретичні та практичні аспекти
Адреса викладання курсу	вул. Кирила і Мефодія 6, ауд. №3
Факультет та кафедра, за якою закріплена дисципліна	Хімічний, кафедра фізичної і колоїдної хімії
Галузь знань, шифр та назва спеціальності	10 Природничі науки 102 Хімія
Викладачі курсу	Дутка В.С., доктор хімічних наук, професор кафедри фізичної і колоїдної хімії.
Контактна інформація викладачів	volodymyr.dutka@lnu.edu.ua vdutka@ukr.net
Консультації по курсу відбуваються	щовівторка, 15:00–17:50 год. (вул. Кирила і Мефодія, ауд № 122) Консультації в день проведення лекцій занять (за попередньою домовленістю).
Сторінка курсу	https://chem.lnu.edu.ua/course/molekuliarne-modeliuvannia-teoriia-ta-prykladni-aspekty
Інформація про курс	Дисципліна «Молекулярне моделювання: теоретичні та практичні аспекти» є вибірковою дисципліною зі спеціальності 102 Хімія, яка викладається у 2 семестрі для магістрів в обсязі 3 кредитів (за Європейською Кредитно-Трансферною Системою ECTS).
Коротка анотація курсу	Курс розроблено таким чином, щоб надати учасникам необхідні знання, обов'язкові для того, щоб розраховувати фізико-хімічні властивості молекул, їхню реакційну здатність, конформаційні стани та інші параметри. Тому у курсі представлено як огляд концепцій молекулярного моделювання , так і процесів та інструментів, які потрібні для реалізації цього завдання.
Мета та цілі курсу	Метою вивчення вибіркової дисципліни «Молекулярне моделювання: теоретичні та практичні аспекти» є ознайомлення студентів із теоретичними основами молекулярного моделювання та набуття практичних навиків такого моделювання для вирішення тих чи інших завдань у галузі хімії. Здобувачі знайомляться з основними квантово-хімічними методами розрахунку структури, електронних параметрів, термодинамічних характеристик тощо.
Література для вивчення дисципліни	<p><i>Основна література:</i></p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Слета Л.О., Іванов В.В. Квантова хімія Харків: «Гімназія». 2008. 443 с. 3. Стрижак П.Є. Квантова хімія. К.: Києво-Могилянська академія, 2009. 458 с. 3. Leach A.R. Molecular modeling. Longman. 1996. 596 p. 4. Вакарчук І.О. Квантова механіка. Львів. 2007. 848 с. 5. Яцимирський К.Б., Яцимирский В.К. Хімічний зв'язок. К. Вища школа. 1992. 246 с. 6. Туровський М.А., Туровська О.М. Практичний курс комп'ютерної структурної хімії. Донецьк. 2004. 137 с. <p><i>Додаткова література:</i></p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Венгер Є.Ф., Грибань В.М., Мельничук О.В. Збірник задач з квантової механіки. К. Вища школа, 2003. 230 с. 2. Fleming Jan Molecular Orbitals and Organic chemical Reaction. 2010. 515 p. 3. Jensen Frank Introduction to Computation chemistry. Wiley. 2007. 599 p. 4. Nguen Trong Anh. Frontier orbitals. A practical manual. Wiley. 2007. 304.

	5. Piela L. Idee chemii kwantowej. Warszawa. Wyd. PWN. 2006. p. 1137.
Тривалість курсу	Один семестр
Обсяг курсу	Навчальний курс охоплює 3 кредити (90 год). Курс складається з 16 год лекційних, 16 годин лабораторних робіт занять та 58 годин самостійної роботи
Очікувані результати навчання	<p>Після завершення цього курсу студент буде:</p> <p><i>знати:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> -наближені методи розв'язку рівнянь Шрьодінгера; -методи квантово-хімічних розрахунків оптимальної геометричної структури, електронних характеристик молекул; -основні напівемпіричні методи квантово-хімічних розрахунків; -основні методи розрахунків <i>ab initio</i>. <p><i>вміти:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> - застосовувати розрахункові методи квантової хімії; - інтерпретувати результати квантово-хімічних розрахунків; - прогнозувати електронні властивості атомів та молекул; - прогнозувати структуру молекул та іонів; - прогнозувати реакційну здатність молекул та іонів. <p>У результаті успішного вивчення курсу студент набуде загальних компетентностей:</p> <p>ЗК 1. Знання та розуміння предметної області та розуміння професійної діяльності</p> <p>ЗК 2. Здатність вчитися і оволодівати сучасними знаннями.</p> <p>ЗК 3. Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу.</p> <p>ЗК 6. Здатність генерувати нові ідеї (креативність).</p> <p>ЗК 7. Здатність використовувати інформаційні та комунікаційні технології.</p> <p>ЗК 12. Здатність працювати автономно.</p> <p>та спеціальних (фахових) компетентностей:</p> <p>СК 1. Здатність використовувати закони, теорії та концепції хімії у поєднанні із вищого рівня математичними інструментами для опису природних явищ.</p> <p>СК 2. Здатність будувати адекватні моделі хімічних явищ, досліджувати їх для отримання нових висновків та поглиблення розуміння природи, в тому числі з використанням методів молекулярного, математичного і комп'ютерного моделювання.</p> <p>СК 5. Здатність застосовувати методи комп'ютерного моделювання для вирішення наукових, хіміко-технологічних проблем та проблем хімічного матеріалознавства.</p> <p>СК 6. Здатність здобувати нові знання в галузі хімії та інтегрувати їх із уже наявними.</p> <p>Програмні результати навчання:</p> <p>ПРН 1 Знати та розуміти наукові концепції та сучасні теорії хімії, а також фундаментальні основи суміжних наук.</p> <p>ПРН 2 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.</p> <p>ПРН 3 Застосовувати отримані знання і розуміння для вирішення</p>

	<p>нових якісних та кількісних задач хімії.</p> <p>ПРН 5 Володіти методами комп'ютерного моделювання структури, параметрів і динаміки хімічних систем.</p> <p>ПРН 9 Збирати, оцінювати та аналізувати дані, необхідні для розв'язання складних задач хімії, використовуючи необхідні методи та інструменти роботи з даними.</p>
Ключові слова	Моделювання молекул, енергетичні параметри, реакційна здатність, фізико-хімічні параметри, конформаційні стани.
Формат курсу	Очний
Теми	<p style="text-align: center;"><i>Теми лекційних занять</i></p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Предмет та завдання курсу «Молекулярне моделювання – теоретичні та прикладні аспекти». Основні досягнення та проблеми квантово-хімічних розрахунків. Обчислення структури та енергії молекул. 2. Квантово-хімічні моделі. Багатоелектронні атоми моделі атомів. Рівняння Гартрі-Фока. Електронна кореляція. 3. Практичні засади застосування розрахункових методів <i>ab initio</i>. Теорія наближених молекулярних орбіталей. 4. Напівемпіричні методи квантово-хімічних розрахунків. Теоретичні засади. Метод орбіталей Гюккеля. 5. Молекулярна механіка. Модель силового поля. Можливості та обмеження моделі силового поля для розрахунку параметрів молекул. 6. Прикладні програми для розрахунку молекул методами молекулярної механіки. Розрахунок термодинамічних параметрів з використанням теорії силового поля. 7. Теорія молекулярних орбіталей. Геометрія молекули Z-матриця. Оптимізація геометрії. Мінімізація енергії. Визначення перехідних структур та шляхів реакції.. 8. Комп'ютерне моделювання. Розрахунок простих термодинамічних властивостей. Практичні аспекти комп'ютерного моделювання. 9. Аналіз отриманих результатів методом молекулярного моделювання та виключення помилок. 10. Комп'ютерне моделювання молекулярної динаміки. Молекулярна динаміка простих систем. Постановка задачі та особливості розрахунків складних систем. 11. Розрахунок констант перехідного стану. Врахування ефектів середовища в молекулярній динаміці. Конформаційний аналіз. 12. Неелектростатичні вклади до вільних енергій. Використання молекулярного моделювання для відкриття нових молекул. 13. Неелектростатичні вклади до вільних енергій. Використання молекулярного моделювання для відкриття нових молекул. 14. Молекулярне моделювання у відкритті ліків. Кількісні відношення структура – активність. 15. Напівемпіричні методи Програма МОРПАК. Можливості програми та межі застосування. 16. Неемпіричні методи розрахунків. Програми серії GAUSSIAN та GAMES. Можливості програм та межі застосування.
Підсумковий контроль, форма	Залік у кінці семестру

Оцінювання здобувачів

№ з/п	Види розрахункових робіт	Оцінювання здобувачів		
		Зміст лабораторних	Форма звітності	Сума балів
1	Розрахунок оптимальної геометричної будови молекул	Міжядерні віддалі, плоскі кути. Опис сполук	Звіт за роботу	10
2	Розрахунок міжядерних віддалей, плоских та дієдральних кутів. Побудова Z-матриць	Дієдральні кути, Z- матриці та їхнє пояснення	Звіт за роботу	10
3	Розрахунок фізико-хімічних параметрів та їх порівняння з експериментальними даними	Теплоти утворення, енергії іонізації, дипольні моменти	Звіт за роботу	10
4	Розрахунок теплот реакції та порівнянні отриманих даних з базою даних NIST	Теплоти утворення сполук Дані з NIST	Звіт за роботу	10
5	Робота з програмою Hyperchem	Структура та можливості програми	Звіт за роботу	10
6	Розрахунок напівемпіричними методами УФ- та ІЧ-спектрів	Опис спектрів та порівняння з експериментальними даними	Звіт за роботу	10
7.	Обчислення дипольних моментів	Дипольні моменти	Звіт за роботу	10
8.	Розрахунок теплот реакцій	Розрахунки за законом Гесса	Звіт за роботу	10

Пререквізити	Для вивчення курсу студенти потребують базових знань з вищої математики, фізики, фізичної хімії, квантової механіки та квантової хімії – дисциплін, достатніх для сприйняття категоріального апарату курсу «Молекулярне моделювання: теоретичні та прикладні аспекти», розуміння джерел та основних закономірностей
Навчальні методи та техніки, які будуть використовуватися під час викладання курсу	Презентація, лекції. Форми – індивідуальні проекти, дискусія, задача звітів.
Необхідне обладнання	Із урахуванням особливостей навчальної дисципліни вивчення курсу потребує використання сучасних квантово-хімічних програм, як от: WINMOPAC 2016, HYPRECHEM, WINMOSTAR, SCHRODINGER та інше програмне забезпечення, крім загальнонавчаних програм і операційних систем.
Критерії оцінювання	Оцінювання проводиться за 100-бальною шкалою. Бали нараховуються

<p>(окремо для кожного виду навчальної діяльності)</p>	<p>таким чином: практичні розрахункові роботи (8 робіт) – 80 балів, лекційні опитування – 10 балів; відповіді на запитання на заліку – 10 балів. Максимальна кількість балів – 100.</p> <p><i>Академічна доброчесність:</i> 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 у письмовій роботі студента є підставою для її незарахування, незалежно від масштабів плагіату чи обману. <i>Відвідання занять</i> 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. <i>Література.</i> Уся література, яку студенти не 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><i>Політика виставлення балів.</i> Враховуються бали набрані за наведеною вище схемою. При цьому беруться до уваги: присутність на заняттях та активність студента під час лабораторних занять; пропуски та запізнені на заняття; користування мобільними пристроями під час заняття в цілях не пов'язаних з навчанням; списування та плагіат; несвоєчасне виконання поставленого завдання.</p> <p>Жодні форми порушення академічної доброчесності не толеруються.</p>
<p>Питання до заліку.</p>	<ol style="list-style-type: none"> 1. Методи обчислення оптимальної структури. 2. Квантово-хімічні моделі. Рівняння Гартрі. 3. Методи квантово-хімічних розрахунків ab initio. Методи DFT. 4. Напівемпіричні методи в програмі MOPAC. 5. Структура та можливості програми HyperChem. 6. Розрахунки простих молекул методом орбіталей Гюккеля 7. Методи розрахунку термодинамічних параметрів. 8. Структура z-матриць. Методи генерування матриць 9. Методи побудови поверхонь потенціальної енергій. 10. Знаходження наймовірніших шляхів реакцій. 11. Конформаційний аналіз. Розрахунок енергії конформерів. 12. Розрахунок енергетичних параметрів хімічних реакцій. 13. Критерії достовірності отриманих параметрів. 14. Прогнозування реакційної здатності та фізіологічної активності ліків. 15. Одноелектронні базисні набори для розрахунків молекул. 16. Особливості розрахунку УФ-спектрів. 17. Розрахунок ІЧ-спектрів. 18. Розрахунок конформаційних станів молекул. 19. Розрахунок водневих зв'язків.
<p>Опитування</p>	<p>Анкету-оцінку з метою оцінювання якості курсу буде надано по завершенню курсу.</p>

Схема курсу

Тиж./ дата / год.-	Тема, план, короткі тези	Форма діяльності (заняття)* *лекція, самостійна, дискусія, групова робота)	Література. Ресурси в інтернеті	Завдання, год	Термін виконання
1	Предмет та завдання курсу «Молекулярне моделювання – теоретичні та прикладні аспекти» енергії молекул.	лекція	Програми ACDLABS 11.0 WINMOPAC 2016, HYPRECHEM, WINMOSTAR, SCHRODINGER	Розрахунок оптимальної геометричної будови молекул	2 тижні
3	Практичні засади застосування розрахункових методів ab initio. Теорія наблизених молекулярних орбіталей.	лекція	Програми ACDLABS 11.0 WINMOPAC 2016, HYPRECHEM, WINMOSTAR, SCHRODINGER	Розрахунок міжядерних віддалей, плоских та дієдральних кутів. Побудова Z-матриць	2 тижні
5	Напівемпіричні методи квантово-хімічних розрахунків. Теоретичні засади. Метод орбіталей Гюккеля.	лекція	Програми ACDLABS 11.0 WINMOPAC 2016, HYPRECHEM, WINMOSTAR, SCHRODINGER	Розрахунок фізико-хімічних параметрів та їх порівняння з експериментальними даними.	2 тижні
7	Теорія молекулярних орбіталей. Геометрія молекули z-матриця. Оптимізація геометрії. Мінімізація енергії. Визначення перехідних структур та шляхів реакції..	лекція	Програми ACDLABS 11.0 WINMOPAC 2016, HYPRECHEM, WINMOSTAR, SCHRODINGER	Розрахунок теплот реакції та порівнянні отриманих даних з базою даних NIST	2 тижні
9	. Розрахунок констант перехідного стану. Врахування ефектів середовища в молекулярній динаміці. Конформаційний аналіз.	лекція	Програми ACDLABS 11.0 WINMOPAC 2016, HYPRECHEM, WINMOSTAR, SCHRODINGER	Робота з програмою Hyperchem	2 тижні
11	Не електроста	лекція		Розрахунок	2 тижні

	тичні вклади до вільних енергій. Використання молекулярного моделювання для відкриття нових молекул.		Програми ACDLABS 11.0 WINMOPAC 2016, HYPRECHEM, WINMOSTAR, SCHRODINGER	напівемпіричні методами УФ- та ІЧ-спектрів	
13	Молекулярне моделювання у відкритті ліків. Кількісні відношення структура – активність..	Лекція	Програми ACDLABS 11.0 WINMOPAC 2016, HYPRECHEM, WINMOSTAR, SCHRODINGER	Обчислення дипольних моментів	2 тижні
15	Не емпіричні методи розрахунків. Програми серії GAUSSIAN та GAMES. Можливості програм та межі застосування.	лекція	Програми ACDLABS 11.0 WINMOPAC 2016, HYPRECHEM, WINMOSTAR, SCHRODINGER	Розрахунок теплот реакцій	2 тижні