

**МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
ПРИКАРПАТСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ВАСИЛЯ СТЕФАНІКА**



Факультет природничих наук

Кафедра хімії

СИЛАБУС НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Моделювання органічних молекул

Затверджено на засіданні кафедри хімії
Протокол № 4 від 16.03.2023 р.

м. Івано-Франківськ – 2023

ЗМІСТ

1. Загальна інформація
2. Опис дисципліни
3. Структура курсу
4. Система оцінювання курсу
5. Оцінювання відповідно до графіку навчального процесу
6. Ресурсне забезпечення
7. Контактна інформація
8. Політика навчальної дисципліни

1. Загальна інформація

Назва дисципліни	Моделювання органічних молекул
Освітньо-професійна програма	Хімія
Спеціальність	102 «Хімія»
Галузь знань	10 «Природничі науки»
Статус дисципліни	Вибіркова
Розподіл за видами занять та годинами навчання	Лекції – 2 год. Лабораторні заняття – 28 год. Самостійна робота – 60 год.
Мова викладання	Українська
Посилання на сайт дистанційного навчання	https://d-learn.pro

2. Опис дисципліни

Мета та цілі курсу
Ознайомити здобувачів вищої освіти з можливостями спеціалізованих комп'ютерних програмних пакетів для молекулярного моделювання. На основі квантово-хімічних розрахунків вміти прогнозувати стан і поведінку створених органічних молекул.
Компетентності
1. Здатність застосовувати знання у практичних ситуаціях. 2. Здатність генерувати нові ідеї (креативність), а також формулювати судження, маючи неповну або обмежену інформацію. 3. Здатність вчитися і оволодівати сучасними знаннями.

3. Структура курсу

№	Тема	Результати навчання	Завдання
1.	Лекція. Візуалізація просторової структури органічних молекул. Програмні пакети, що реалізують сучасні методи комп'ютерної хімії.	Ознайомитися з програмними пакетами HyperChem, GAMESS, Gaussian, Mercury, MOLPRO, які використовуються для візуалізації просторової структури органічних молекул.	Питання
2.	Лабораторне заняття 1. Створення та редагування простих молекулярних структур за допомогою програмного пакету HyperChem 8.0.	Опанування методики користування програмою HyperChem 8.0. Знайомство з інтерфейсом програми HyperChem 8.0. Знання основних можливостей пакету.	Питання, завдання до лабораторної роботи
3.	Лабораторне заняття 2. Побудова просторових моделей органічних молекул за допомогою програмних пакетів.	Вміння побудови та редагування просторових (3D) молекулярних структур. Розрахунок довжини зв'язків і кутів між ними в молекулярних моделях, дипольних моментів та потенціалу іонізації молекул.	Питання, завдання до лабораторної роботи
4.	Лабораторне заняття 3. Розрахунок енергетичних показників для молекулярних систем за допомогою програмного пакету HyperChem 8.0.	Опанування методики проведення розрахунків енергетичних параметрів молекул на основі програми HyperChem.	Питання, завдання до лабораторної роботи
5.	Лабораторне заняття 4. Геометрична оптимізація	Вміти визначати геометричні параметри молекулярної моделі.	Питання, завдання до

	молекул для знаходження найбільш стабільних конформацій за алгоритмами Steepest Descent, Fletcher-Reeves, Polak-Ribiere.	Ознайомитися з оптимізацією геометрії молекулярної структури та різними алгоритмами оптимізації пакетних програм.	лабораторної роботи
6.	Лабораторне заняття 5. Розрахунок властивостей молекулярних систем шляхом врахування параметрів ab initio за допомогою квантово-хімічного програмного пакету GAMESS.	Знайомство з інтерфейсом програми GAMESS. Знання основних можливостей пакету. Вміння розраховувати властивості молекулярних систем.	Питання, завдання до лабораторної роботи
7.	Лабораторне заняття 6. Тривимірні візуалізації кристалічної структури за допомогою програмного пакету Mercury.	Знайомство з інтерфейсом програми Mercury. Знання основних можливостей пакету.	Питання, завдання до лабораторної роботи
8.	Лабораторне заняття 7. Підсумкове заняття. Залікова робота.	Відповідно до отриманого індивідуального завдання спрогнозувати стан і поведінку органічних молекул за допомогою програмних пакетів.	Питання, завдання до залікової роботи

4. Система оцінювання курсу

Види навчальної роботи	Максимальна кількість балів
Лекція	0
Лабораторні заняття	60
Самостійна робота	10
Залік	30
Максимальна кількість балів	100

5. Оцінювання відповідно до графіку навчального процесу

Види навчальної роботи	Навчальні тижні																	Разом
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	
Лекція																		0
Лабораторні заняття			10		10		10				10		10		10			60
Самостійна робота									10									10
Залік																	30	30
Всього за тиждень			10		10		10		10		10		10		10		30	100

6. Ресурсне забезпечення

Матеріально-технічне забезпечення: мультимедійний проектор, комп'ютерні програмні пакети.

Література

1. Ramachandran K.I., Deera G., Namboori K. Computational chemistry and molecular modelling: principles and applications. Berlin: Springer, 2008. – 396 p. <https://doi.org/10.1007/978-3-540-77304-7>.

2. Hedman F. Algorithms for Molecular Dynamics Simulations. Advancing the Computational Horizon. Stockholm: Stockholms Universitet. 2006. – 93 p.
3. Zaheer Ul-Haq & Jeffry D. Madura, Frontiers in Computational Chemistry: Computer Applications for Drug Design and Biomolecular Systems (Volume 2), 431 p., 2015 Bentham Science Publishers Ltd. Published by Elsevier Inc. ISBN: 978-1-60805-979-9.
4. HyperChem Release 7 for Windows. Getting Started. Copyright © 2002 Hypercube, Inc.

7. Контактна інформація

Кафедра	Хімії вул. Галицька, 201Б, ауд. 308 https://kc.pnu.edu.ua
Викладач	к.х.н., доц. Солтис Любов Михайлівна
Контактна інформація викладачів	liubov.soltys@pnu.edu.ua

Викладач

Любов СОЛТИС