

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



Факультет природничих наук

Кафедра хімії

СИЛАБУС НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Моделювання органічних молекул

Рівень вищої освіти **перший (бакалаврський)**

Освітня програма **Хімія**

Спеціальність **102 Хімія**

Галузь знань **10 Природничі науки**

Затверджено на засіданні кафедри хімії
протокол № 1 від “25” січня 2024 р.

м. Івано-Франківськ – 2024 р.

1. Загальна інформація

Назва дисципліни	Моделювання органічних молекул
Викладач (і)	Солтис Любов Михайлівна
Контактний телефон викладача	0679567542
E-mail викладача	liubov.soltys@pnu.edu.ua
Формат дисципліни	Обов'язкова дисципліна
Обсяг дисципліни	3 кредити ЄКТС, 90 год.
Посилання на сайт дистанційного навчання	https://d-learn.pnu.edu.ua/
Консультації	щотижня

2. Анотація до навчальної дисципліни

Предметом вивчення навчальної дисципліни є спеціалізовані програмні пакети для моделювання органічних молекул.

3. Мета та цілі навчальної дисципліни

Навчити студентів працювати зі спеціалізованим програмним пакетом HyperChem 8.0. для молекулярного моделювання. На основі квантово-хімічних розрахунків вміти прогнозувати стан і поведінку створених органічних молекул.

4. Програмні компетентності та результати навчання

Загальні компетентності (ЗК):

ЗК2. Здатність вчитися і оволодівати сучасними знаннями.

ЗК5. Навички використання інформаційних і комунікаційних технологій.

ЗК10. Здатність до пошуку, оброблення та аналізу інформації з різних джерел.

Спеціальні (фахові, предметні) компетентності (СК):

СК4. Здатність до використання спеціального програмного забезпечення та моделювання в хімії.

СК10. Здатність до опанування нових областей хімії шляхом самостійного навчання.

Програмні результати навчання (ПРН):

ПРН15. Спроможність використовувати набуті знання та вміння для розрахунків, відображення та моделювання хімічних систем та процесів, обробки експериментальних даних.

ПРН16. Виконувати комп'ютерні обчислення, що мають відношення до хімічних проблем, використовуючи стандартне та спеціальне програмне забезпечення, навички аналізу та відображення результатів.

5. Організація навчання

Обсяг навчальної дисципліни	
Вид заняття	Загальна кількість годин
лекції	6
лабораторні заняття	24
самостійна робота	60

Ознаки навчальної дисципліни			
Семестр	Спеціальність	Курс (рік навчання)	Нормативний / вибірковий
Шостий	102 Хімія	Третій	Нормативний

Тематика навчальної дисципліни			
Тема	кількість год.		
	лекції	лаборат. заняття	сам. роб
Тема 1. Візуалізація просторової структури органічних молекул. Програмні пакети, що реалізують сучасні методи комп'ютерної хімії.	2	–	8
Тема 2. Обчислювальні методи, що використовуються в молекулярному моделюванні.	2	–	8
Тема 3. Типи обчислень і їх алгоритми: геометрична оптимізація, одноточковий розрахунок, розрахунок перехідного стану.	2	–	8
Лабораторне заняття 1. Створення та редагування структурної моделі органічної молекули. Створення та редагування 2D-ескізу молекулярної моделі. Перетворення 2D-ескізу в 3D-структурну модель. Редагування 3D-структурної моделі.	–	4	6
Лабораторне заняття 2. Визначення величин структурних параметрів молекулярної структури.	–	4	6
Лабораторне заняття 3. Розрахунок потенціалів іонізації органічної молекули.	–	4	6

Лабораторне заняття 4. Геометрична оптимізація молекул для знаходження найбільш стабільних конформацій за алгоритмом Steepest Descent.	–	4	6
Лабораторне заняття 5. Геометрична оптимізація молекул для знаходження найбільш стабільних конформацій за алгоритмами Fletcher-Reeves та Polak-Ribiere.	–	4	6
Лабораторне заняття 6. Розрахунок і аналіз ІЧ – спектрів хімічних сполук за технологією комплексу програм HyperChem.	–	4	6
ЗАГ.:	6	24	60

6. Система оцінювання навчальної дисципліни

Загальна система оцінювання навчальної дисципліни	Екзамен: максимальна оцінка – 100 балів. Допуск до екзамену – 50 балів (за лабораторні заняття). Екзамен – 50 балів.
Лабораторні заняття	Після виконання лабораторної роботи студент повинен оформити звіт до кожної роботи, а також захистити їх у викладача. Максимум – 10 балів за кожну роботу. За виконання лабораторного практикуму студент може отримати максимум 50 балів до допуску.
Умови допуску до підсумкового контролю	За роботу на лабораторних заняттях студент повинен набрати в сумі не менше 25 балів, щоб отримати допуск до складання екзамену. Виконання 100% завдань на лабораторних заняттях, а також студент повинен здати оформлені звіти до всіх робіт. Відвідування більше 50% лекційних занять.
Підсумковий контроль	Форма контролю: екзамен. Форма здачі: комбінована (усна, письмова).

7. Політика навчальної дисципліни

<ul style="list-style-type: none"> • Неприпустимі списування, студент повинен вільно володіти матеріалом. • Лекційні заняття не відпрацьовуються, але знання лекційного матеріалу обов'язкове. • Пропуски лабораторних занять відпрацьовуються наступним чином: опрацювання теми, а також виконання лабораторної роботи в такий час, щоб не заважати проведенню інших лабораторних робіт. • Якщо студент не відпрацював пропущені лабораторні заняття, він не допускається до екзамену.

- Обов'язковим є для отримання екзамену відвідування більш 50% занять, виконання лабораторного практикуму (набрати в сумі не менше 25 балів), а також виконання самостійної роботи.

8. Рекомендована література

1. Ramachandran K.I., Deepa 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. Комп'ютерна структурна хімія: навчальний посібник / М.А. Туровський, О.М. Пастернак. Донецьк: ДонНУ, 2009. –153 с.
4. 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.
5. Практикум з комп'ютерної хімії. Навчальний посібник / О.С. Бондар. – Чернігів: ЧНПУ, 2017. – 68 с.
6. HyperChem Release 7 for Windows. Getting Started. Copyright © 2002 Hypercube, Inc.

Викладач: к.х.н. Солтис Л.М.