

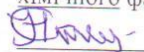
Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара

Факультет хімічний

Кафедра фізичної, органічної та неорганічної хімії

**«ЗАТВЕРДЖУЮ»**

Голова науково-методичної ради  
хімічного факультету

 Надія СТЕЦЬ

«01» 09 2023 р.

**РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ**

ОК 2.2 Прикладна комп'ютерна хімія

**для здобувачів вищої освіти**

рівень вищої освіти

другий (магістерський)

галузь знань

10 Природничі науки

спеціальність

102 Хімія

освітня програма

Хімія

рік набору 2023/2024

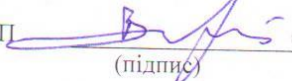
вид дисципліни

Розробники:

Оковитий С.І., доктор хімічних наук, професор кафедри фізичної, органічної та неорганічної хімії

Борисенко І.О., асистент кафедри фізичної, органічної та неорганічної хімії

Погоджено гарант ОП

  
(підпис)

Віктор ВАРГАЛЮК

(ім'я та прізвище)

Робоча програма схвалена на засіданні кафедри фізичної, органічної та неорганічної хімії

Протокол від «28» серпня 2023 року №1

Ухвалено на засіданні науково-методичної ради хімічного факультету

Протокол від «01» вересня 2023 року №1

Дніпро  
2023

## Опис навчальної дисципліни

Навчальний рік (роки*) викладання дисципліни	Курс	Семестр	Підсумковий контроль				Індивідуальні завдання		Кредитів ECTS	Обсяг роботи студента (години)						
			екзамен	диф.залик	залик	курслова робота	форма	кількість		всього	аудиторні					самостійна робота
											всього аудиторних	лекції	практичні заняття	семінарські заняття	лабораторні заняття	
2023/24	1	1	1				кмп	1	3	90	40	16			24	50

### 1. Мета дисципліни.

Курс «Прикладна комп'ютерна хімія» є складовою частиною сучасної теоретичної хімії. Метою цього курсу є навчання студентів застосовувати сучасні спеціалізовані комп'ютерні програми при проведенні наукових досліджень; сформувати вміння самостійно розраховувати електронну будову молекулярних систем з використанням сучасних квантово-хімічних обчислювальних програм.

#### **Вивчення дисципліни забезпечує формування компетентностей за ОП:**

ЗК3. Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу.

ЗК4. Здатність застосовувати знання у практичних ситуаціях.

ЗК6. Здатність генерувати нові ідеї (креативність).

ЗК7. Здатність використовувати інформаційні та комунікаційні технології.

СК1. Здатність використовувати закони, теорії та концепції хімії у поєднанні із відповідними математичними інструментами для опису природних явищ.

СК2. 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.

СК5. Здатність застосовувати методи комп'ютерного моделювання для вирішення наукових, хіміко-технологічних проблем та проблем хімічного матеріалознавства.

СК9. Здатність обирати оптимальні методи та методики дослідження. Здатність кваліфіковано вибирати хімічні та інструментальні методи, які необхідні для розробки методик аналізу об'єктів навколишнього середовища, лікарських та харчових продуктів, матеріалів та виробів, інших об'єктів промисловості, сільського господарства та інших.

### 2. Попередні вимоги до опанування або вибору навчальної дисципліни (за наявності).

Вивчення дисципліни базується на знаннях отриманих при опануванні курсів навчального плану спеціальності 102 Хімія «Вища математика», «Фізика», «Квантова хімія», «Будова речовини», «Неорганічна хімія», «Фізична хімія», «Аналітична хімія», «Органічна хімія».

### 3. Результати навчання за дисципліною та їх співвідношення із програмними результатами навчання.

№	Результати навчання за дисципліною	Програмні результати навчання за ОП	Номери тем
1	Знати основні поняття, визначення, методи і підходи, які використовуються в молекулярному моделюванні силовими полями, розрахунках спектральних характеристик сполук; можливості комп'ютерної реалізації молекулярного моделювання та типові завдання, які вирішуються з його допомогою.	ПР01. Знати та розуміти наукові концепції та сучасні теорії хімії, а також фундаментальні основи суміжних наук.	T1 T2 T3 T4
2	Знати базові алгоритми для чисельного інтегрування рівнянь руху молекулярної системи; місце і роль молекулярного моделювання в хімії, способи врахування впливу зовнішнього середовища і наявність різних граничних умов.	ПР02. 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.	T1 T2 T3 T4
3	Вміти проводити розрахунки для модельних молекулярних систем з використанням різних програмних засобів.	ПР03. Застосовувати отримані знання і розуміння для вирішення нових якісних та кількісних задач хімії.	T3 T4 T5 T6
4	Вміти проводити обробку результатів молекулярно-динамічних розрахунків та розрахований ІК, раманівських, УФ, ЯМР спектрів.	ПР05. Володіти методами комп'ютерного моделювання структури, параметрів і динаміки хімічних систем.	T3 T4 T5 T6
5	Повинен демонструвати здатність і готовність самостійно ставити і вирішувати завдання, пов'язані з моделювання складних систем.	ПР09. Збирати, оцінювати та аналізувати дані, необхідні для розв'язання складних задач хімії, використовуючи відповідні методи та інструменти роботи з даними.	T3 T4 T5 T6
6		ПР10. Планувати, організовувати та здійснювати експериментальні дослідження з хімії з використанням сучасного обладнання, грамотно обробляти їх результати та робити обґрунтовані висновки.	T3 T4 T5 T6

#### 4. Структура навчальної дисципліни.

#### 4. Структура навчальної дисципліни.

1 семестр

Форма навчання денна

№ п/п	Номер і назва теми	Кількість годин*			
		лекції	семінарські/практичні	Лабораторні заняття	Самостійна робота
<b>Розділ 1 Класифікація та функції моделювання хімічних систем, квантово-хімічні методи</b>					
1	<b>Тема 1.</b> Класифікація моделей. Основні функції моделей.	1		-	4
2	<b>Тема 2.</b> Класифікація квантово-хімічних методів дослідження.	1		-	4
3	<b>Тема 3.</b> Моделювання спектральних властивостей молекул.	4		8	12
<b>Розділ 2 Моделювання динаміки молекулярних систем</b>					
1	<b>Тема 4.</b> Метод молекулярної динаміки. Мікроканонічні та канонічні ансамблі.	6		12	14
2	<b>Тема 5.</b> Метод броунівської динаміки.	2		2	8
3	<b>Тема 6.</b> Метод Монте-Карло.	2		2	8
	<b>ВСЬОГО</b>	16		24	50

#### Тематика лабораторних занять

№ Темі	Тематика (назва) лабораторного заняття	Кількість годин	Рекомендована література (№ з переліку)
<b>Розділ 1. Класифікація та функції моделювання хімічних систем, квантово-хімічні методи</b>			
1	2	3	4
Тема 3.	Розрахунок ІЧ спектру молекули формальдегіду. Вплив ізотопних змін на раманівський спектр бензолу. Розрахунок УФ спектру молекули акролеїну. Розрахунок ЯМР-спектру пропану.	8	основна: 4,5 додаткова: 9,10,11
Тема 4.	Молекулярно-динамічне моделювання системи диметилловий етер – диметоксоній катіон. Моделювання першої сольватної оболонки метокси-аніону. «Відпал» бутану. Моделювання пружності полімерного ланцюгу на прикладі димерів бутадієну.	12	основна: 1,2,3 додаткова: 6
Тема 5.	Моделювання динамічної та рівноважної поведінки цвітеріонів аланіну з урахуванням	2	основна: 1,2,3 додаткова: 6

	сольватації.		
Тема 6.	Моделювання динамічної та рівноважної поведінки цвітеріонів аланіну з урахуванням сольватації.	2	основна: 1,2,3 додаткова: 6
<b>Всього годин</b>		<b>24</b>	-

### Тематика самостійної роботи

№ Теми	Тема самостійної роботи	Кількість годин	Рекомендована література (№ з переліку)
1	2	3	4
Тема 1	Галузі ефективного застосування методів молекулярної механіки, квантової хімії і молекулярної динаміки для моделювання хімічних систем.	4	додаткова: 3,6,7,8 наукометрична база Web of science
Тема 2	Ефективність застосування напівемпіричних, неемпіричних методів і методу функціоналу густини для моделювання спектральних характеристик хімічних сполук на прикладах.	4	додаткова: 3,6,7,8 наукометрична база Web of science
Тема 3	Критерії вибору методів для розрахунків спектральних характеристик хімічних сполук.	6	додаткова: 3,6,7,8 наукометрична база Web of science
	Виконання завдання для самостійної роботи до лабораторної роботи за даною темою.	6	
Тема 4	Методи управління молекулярно-динамічним моделюванням: ізотермічно-ізобаричний (NPT), великий канонічний.	6	додаткова: 9, 10, 12
	Виконання завдання для самостійної роботи до лабораторної роботи за даною темою.	8	
Тема 5	Переваги та недоліки термостата Ланжевена.	4	додаткова: 11, 12
	Виконання завдання для самостійної роботи до лабораторної роботи за даною темою.	4	
Тема 6	Порівняння переваг і недоліків методів молекулярної динаміки, динаміки Ланжевена і метода Монте-Карло для моделювання хімічних систем.	4	додаткова: 11, 12
	Виконання завдання для самостійної роботи до лабораторної роботи за даною темою.	4	
<b>Всього годин</b>		<b>50</b>	-

## 5. Схема формування оцінки.

### 5.1 Шкала відповідності оцінювання:

Відмінно/Excellent	Зараховано/Passed	90-100
Добре/Good		82-89
		75-81
Задовільно/Satisfactory		64-74
		60-63
Незадовільно/Fail	Не зараховано/Fail	0-59

## 5.2 Форми та організація оцінювання:

### Поточний контроль:

Форма оцінювання	Термін оцінювання (тиждень)	Максимальна кількість балів
<i>Контрольне тестування за темами:</i> КМР	16-17 тижні	30
<i>Виконання та захист лабораторних робіт:</i> ЛР 1. ЛР 2. ЛР 3. ЛР 4. ЛР 5. ЛР 6. ЛР 7. ЛР 8. ЛР 9.	8-9 тижні 8-9 тижні 10-11 тижні 10-11 тижні 12-13 тижні 12-13 тижні 14-15 тижні 14-15 тижні 16-17 тижні	4 4 4 2 4 2 2 3 5
<b>Максимальна кількість балів за поточне оцінювання</b>		60

### Семестровий контроль:

Умови до складання екзамену: до екзамену допускають здобувачів вищої освіти, які пройшли оцінювання за всіма формами поточного контролю, передбаченого робочою програмою

Форма оцінювання	Терміни оцінювання (тиждень)	Максимальна кількість балів
Екзамен	19-22 тиждень	40

## 5.3 Критерії оцінювання:

<b>Критерії оцінювання знань здобувачів*</b>	
<b>Лабораторне заняття</b>	
враховується:	
<ul style="list-style-type: none"> <li>– повнота виконання комп'ютерного моделювання заданої хімічної системи і процесу;</li> <li>– повнота виконання завдання для самостійного виконання до кожної лабораторної роботи;</li> <li>– логічність, послідовність та зрозумілість викладення матеріалу при оформленні звіту;</li> <li>– вміння аналізувати та оцінювати факти, інтерпретувати графіки, діаграми тощо;</li> <li>– уміння застосовувати правила, методи, принципи, закони в конкретних ситуаціях;</li> <li>– дотримання принципів академічної доброчесності;</li> <li>– вміння користуватися хімічною мовою;</li> <li>– осмислення та глибина розуміння досліджуваної проблеми;</li> <li>– здатність узагальнювати отримані знання;</li> </ul>	
здатність до критичного мислення.	
0 балів «незадовільно»	Робота не виконана. До захисту не допускається.
25% від максимальної кількості балів	Студент не володіє навчальним матеріалом. Робота виконана із переважною більшістю помилок, здобувач має поверхнєве уявлення щодо мети та практичного призначення роботи, неспроможний

	надати відповіді на запитання. Під час захисту роботи здобувач дає неповні відповіді лише на окремі запитання; відсутня ґрунтовна аргументація власної думки.
50% від максимальної кількості балів	Лабораторна робота виконана з декількома помилками. Під час захисту роботи здобувач дає відповіді не на усі запитання, іноді відповіді фрагментарні; аргументація власної думки не завжди доведена; наявне репродуктивне застосування знань; важко проаналізувати отримані результати і зробити висновки.
75% від максимальної кількості балів	Лабораторна робота і завдання для самостійної роботи виконані правильно, або з 1-2 незначними помилками. Звіт з лабораторної роботи оформлений не в повному обсязі. Під час захисту роботи здобувач надає неповні відповіді на запитання, зокрема й на додаткові питання, які включають тематику самостійної роботи, демонструє уміння визначати головні та найбільш актуальні аспекти роботи; вдало аргументує власну думку; демонструє аналітичні навички в обговоренні отриманих результатів.
100% від максимальної кількості балів	Лабораторна робота і завдання для самостійної роботи виконані правильно. Звіт з лабораторної роботи оформлений в повному обсязі. Під час захисту роботи здобувач надає повні та ґрунтовні відповіді на всі запитання, зокрема й на додаткові питання, які включають тематику самостійної роботи; демонструє уміння визначати головні та найбільш актуальні аспекти роботи; вдало аргументує власну думку; демонструє аналітичні навички в обговоренні переваг і недоліків кожного із трактувань обговорюваної проблеми.
<b>Контрольна модульна робота</b>	
враховується:	
<ul style="list-style-type: none"> <li>– ступінь глибини розуміння та засвоєння теоретичного і практичного матеріалу;</li> <li>– дотримання принципів академічної доброчесності;</li> <li>– вміння користуватися хімічною мовою;</li> <li>– здатність до критичного мислення.</li> </ul>	
0-4 балів «незадовільно»	Не володіє навчальним матеріалом та не розуміє змісту теоретичного питання
5-15 балів «задовільно»	Частково володіє навчальним матеріалом, не дає відповіді на більшу частину теоретичних питань
16-27 балів «добре»	В цілому володіє навчальним матеріалом, відповідає на більшу частину теоретичних питань, допускаючи при цьому окремі суттєві неточності та помилки
28-30 балів «відмінно»	Достатньо повно володіє навчальним матеріалом, правильно відповідає на всі теоретичні питання
<b>Екзамен</b>	
враховується:	
<ul style="list-style-type: none"> <li>– ступінь глибини розуміння та засвоєння досліджуваного питання;</li> <li>– дотримання принципів академічної доброчесності;</li> <li>– вміння користуватися хімічною мовою;</li> <li>– здатність узагальнювати отримані знання;</li> <li>– здатність до критичного мислення</li> </ul>	
0-23 балів «незадовільно»	Не володіє навчальним матеріалом та не розуміє змісту теоретичного питання
24-28 балів	Частково володіє навчальним матеріалом, не в змозі відповісти на

«задовільно»	більшу частину теоретичних питань
29-35 балів «добре»	В цілому володіє навчальним матеріалом, відповідає на більшу частину теоретичних питань, допускаючи при цьому окремі суттєві неточності та помилки
36-40 балів «відмінно»	Достатньо повно володіє навчальним матеріалом, правильно відповідає на всі теоретичні питання

\*Так як лабораторні роботи мають різну кількість етапів до виконання і потребують володіння більшою кількістю теоретичних знань, що виражається в різній максимальній кількості балів за виконання лабораторної роботи, критерії оцінювання виражені у відсотках від максимальної кількості балів за окрему лабораторну роботу.

## **6. Методи навчання, інструменти, обладнання та програмне забезпечення, використання яких передбачає навчальна дисципліна:**

Методи навчання:

інтерактивне навчання (активне залучення здобувача вищої освіти до навчального процесу під час дискусій, бесід);

- словесні методи (пояснення);
- наочні методи (презентації);
- практичні методи (виконання лабораторних робіт);
- методи аналітичного та критичного мислення – інтелектуальна діяльність здобувача, спрямована на вирішення конкретного завдання;
- самостійне навчання (опанування питань для самостійної роботи, виконання самостійних завдань до лабораторних робіт в результаті аналізу рекомендованої навчальної та наукової літератури).

Інструменти та обладнання:

Обладнання та програмне забезпечення комп'ютерного класу ауд. № 210.

Комп'ютери (Intel(R) Pentium (R) Gold G5400 CPU @ 3.70 GHz, оперативна пам'ять 4.00 ГБ, процесор x64).

Комп'ютер (Intel(R) Core (TM) i5-7400 CPU @ 3.00 GHz, оперативна пам'ять 8.00 ГБ, процесор x64).

Мультимедійний проектор EIKI LC-XAUZ00w.

Інтерактивна дошка SMART BOARD M680V.

Обладнання для телепрезентацій CISCO CTS.

Аудіоконференцсистема PHOENIX NT503AUDIO.

Персональні ноутбуки і комп'ютери студентів.

Програмне забезпечення: Windows 10 Pro, Microsoft Office, Games, MOPAC2016, Avogadro, HyperChem, Gromacs, Gaussian, Gaussview.

## **7. Рекомендована література**

### **Основна**

1. Оковитий С.І. Лабораторний практикум із дисципліни «Теоретичне модулювання хімічних систем» / С.І. Оковитий, Я.С. Бондаренко. – Дніпропетровськ: РВВ ДНУ, 2012 – 28 с.
2. HyperChem release 7.0 for Windows : reference manual / Hypercube, Inc., USA, 2002, P.2220.
3. Balbuena P.B. Molecular Dynamics. From Classical to Quantum Methods. Eds. In series: Theoretical and Computational Chemistry / P.B. Balbuena, J.M. Seminario. – Amsterdam: Elsevier, 1999, Vol. 7.– 946 p.
4. Оковитий С.І. Квантово-хімічне дослідження структури та реакційної здатності хімічних сполук : методичні рекомендації до виконання лабораторних робіт. / С.І. Оковитий, І.О. Борисенко. – Дніпро : РВВ ДНУ, 2021 – 44 с.



5. Foresman J. B. Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods, 3rd ed. / J. B. Foresman, A.E. Frisch. – Gaussian, Inc.: Wallingford, CT, 2015. ISBN: 978-1-935522-03-4

#### **Додаткова**

1. Haile J. M. Molecular dynamics simulation. Elementary methods. / J. M. Haile. – New York: John Wiley & Sons Inc., 1992. – 489 p.
2. Berendsen H. J. C. Simulating the Physical World: Hierarchical Modeling from Quantum Mechanics to Fluid Dynamics. / H. J. C. Berendsen. – Cambridge: Cambridge University Press, 2007. – 624 p.
3. Jensen F. Introduction to Computational Chemistry. / F. Jensen. – Wiley, 2006. – 624 p.
4. Бутырская Е. В. Компьютерная химия: основы теории и работа с программами Gaussian и GaussView. / Е. В. Бутырская. – М.: СОЛОН Пресс, 20011. – 224 с.
5. Ютілова К. С. Комп'ютерне моделювання хімічних процесів : навч. посібник. / К. С. Ютілова. – Вінниця : ДонНУ імені Василя Стуса, 2019. – 56 с.
6. Kapusta, K., Voronkov, E., Okovytyu, S., Korobov, V., Leszczynski, J. Reconstruction of STO-3G Family Basis Set for the Accurate Calculation of Magnetic Propertie. Russian Journal of Physical Chemistry A, 2018, 92(13), pp. 2827–2834.
7. Borysenko, I.O., Sviatenko, L.K., Okovytyu, S.I., Leszczynski, J. Efficient approach for exploring the multiple-channel bimolecular interactions of conformationally flexible reagents. Epoxide ring opening reaction. Structural Chemistry, 2021, 32(2), pp. 581–589.
8. Sviatenko, L.K., Gorb, L., Leszczynska, D., Okovytyu, S.I., Shukla, M.K., Leszczynski, J. Catalytic role of solvated electron in the spontaneous degradation of insensitive munition compounds: computational chemistry investigation. Structural Chemistry, 2021, 32(2), pp. 521–527.
9. Huang, C., Li, C., Choi, P. Y. K., Nandakumar, K., & Kostiuk, L. W.). A novel method for molecular dynamics simulation in the isothermal–isobaric ensemble. Molecular Physics, 2011, 109(2), pp. 191–202. doi:10.1080/00268976.2010.513345
10. Boinepalli, S., & Attard, P. Grand canonical molecular dynamics. The Journal of Chemical Physics, 2002, 119(24), pp. 12769–12775. doi:10.1063/1.1629079
11. Hünenberger, P. H. Thermostat Algorithms for Molecular Dynamics Simulations. Advances in Polymer Science, 2005, pp. 105–149. doi:10.1007/b99427
12. Paquet, E., & Viktor, H. L. Molecular Dynamics, Monte Carlo Simulations, and Langevin Dynamics: A Computational Review. BioMed Research International, 2015, pp. 1–18. doi:10.1155/2015/183918

#### **8. Інформаційні ресурси**

1. <http://www.freebookcentre.net/chemistry-books-download/Lecture-Notes-in-Computational-Chemistry.html>
2. <https://pubs.rsc.org/en/content/chapterhtml/2017/bk9781782627005-00001?isbn=978-1-78262-700-5&sercode=bk>