

КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

Інститут високих технологій

Кафедра молекулярної біотехнології та біоінформатики

«ЗАТВЕРДЖУЮ»

Заступник директора
з науково-педагогічної роботи
Галина ГРАБЧУК

«25» червня 2020 року

Григорів 213

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

ОБЧИСЛЮВАЛЬНА ХІМІЯ

для студентів

галузь знань 09 «Біологія»
спеціальність 091 «Біологія»
освітній рівень Магістр
освітня програма «Біоінформатика та структурна біологія»
(назва освітньої програми)
вид дисципліни обов'язкова

Форма навчання	денна
Навчальний рік	2021/2022
Семестр	1
Кількість кредитів ECTS	3
Мова викладання, навчання та оцінювання	українська
Форма заключного контролю	залік

Викладачі: Войтешенко Іван Сергійович

Пролонговано: на 20²¹/20²² н.р.  (І.В.В.) «05» 03 20²¹ р. проф. 213
(підпис, ПІБ, дата)

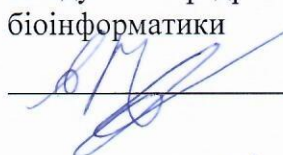
на 20__/20__ н.р. _____ (_____) «__» __ 20__ р.
(підпис, ПІБ, дата)

КИЇВ – 2020

Розробник(и): Войтешенко Іван Сергійович, к.ф.-м.н., асистент, кафедра молекулярної біотехнології та біоінформатики

«ЗАТВЕРДЖЕНО»

Завідувач кафедри молекулярної біотехнології та біоінформатики

 Олексій НИПОРКО

Протокол № 12 від «12» серпня 2020р.

Схвалено науково - методичною комісією
«Інституту високих технологій»
Київського національного університету імені Тараса Шевченка

Протокол від «24» серпня 2020 року № 3

Голова науково-методичної комісії  (Русінчук Н.М.)

«24» серпня 2020 року

ВСТУП

1. Мета дисципліни – є ґрунтовне вивчення причин просторової будови, структурно-динамічних властивостей основних класів низькомолекулярних сполук та біополімерів методами сучасних розрахункових фізико-хімічних методів досліджень.

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

1. Знати основні поняття теорії квантової механіки, основи хімії низькомолекулярних сполук та полімерів, основні закономірності курсів молекулярної фізики, оптики, електрики, атомної та ядерної фізики.
2. Вміти застосовувати основні методи прикладної квантової механіки та хімії для розрахунку типових задач, що мають аналітичні розв'язки.
3. Володіти основним апаратом лінійної алгебри та тензорним аналізом, основами програмування та алгоритмізації.

3. Анотація навчальної дисципліни:

Предметом навчальної дисципліни «Обчислювальна хімія» є вивчення структурно-динамічних властивостей низькомолекулярних сполук та основних класів біополімерів сучасними розрахунковими методами.

У курсі детально розглядаються найбільш поширені підходи до вивчення просторової будови, структурно-динамічних властивостей низькомолекулярних сполук, основних класів біополімерів, їхніх основних фізико-хімічних підвалин функціонування та конформаційних змін методами *ab initio*.

4. Завдання (навчальні цілі): Дисципліна забезпечує набуття студентами таких компетентностей:

ЗК02. Здатність використовувати інформаційні та комунікаційні технології.

СК01. Здатність користуватися новітніми досягненнями біології, необхідними для професійної, дослідницької та/або інноваційної діяльності. Здатність застосовувати знання у професійній діяльності з урахуванням новітніх досягнень, у т.ч. для дослідницької роботи.

СК02. Здатність формулювати задачі моделювання, створювати моделі об'єктів і процесів на прикладі різних рівнів організації живого із використанням математичних методів й інформаційних технологій.

СК03. Здатність користуватися сучасними інформаційними технологіями та аналізувати інформацію в галузі біології і на межі предметних галузей.

5. Результати навчання за дисципліною:

Результат навчання		Форми (та/або методи і технології) викладання і навчання	Методи оцінювання та пороговий критерій оцінювання (за необхідності)	Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни
Код	Результат навчання			
1.1	Знати та вміти моделювати будову, структурно-динамічні властивості низькомолекулярних сполук та біополімерів: нуклеїнових кислот та білків, Значи сучасні фізико-хімічні розрахункові методи. Ознайомлення зі спеціальним програмним забезпеченням для розрахунків або оцінювання необхідних параметрів низькомолекулярних сполук та біополімерів. Вивчення основ ОС Linux та реалізація алгоритмів.	лекції	теоретичні запитання на заліку (тестова форма)	40
2.1	Вміти застосовувати спеціальне програмне забезпечення для розрахунків або оцінювання необхідних параметрів низькомолекулярних	практичні роботи	звіти по практичних роботах	30

	<i>сполук та біополімерів. Опису їхніх конформаційних змін та основ функціонування. Вивчення основ ОС Linux та реалізація алгоритмів.</i>			
4.1	<i>Приймати та обґрунтувати рішення щодо вибору типу моделі, підходів моделювання та програмного комплексу для описання фізичних, біологічних чи хімічних процесів, у тому числі, складних систем.</i>	<i>лекції, практичні роботи, самостійна робота студента</i>	<i>звіти по практичних роботах включаючи самостійно опрацьовані матеріали</i>	30

6. Співвідношення результатів навчання дисципліни із програмними результатами навчання

Програмні результати навчання	Результати навчання дисципліни		
	1.1	2.1	4.1
ПР2. Використовувати бібліотеки, інформаційні бази даних, інтернет ресурси для пошуку необхідної інформації.		+	+
ПР4. Розв'язувати складні задачі в галузі біології, генерувати та оцінювати ідеї.		+	+
ПР6. Аналізувати біологічні явища та процеси на молекулярному, клітинному, організменному, популяційно-видовому та біосферному рівнях з точки зору фундаментальних загальнонаукових знань, а також за використання спеціальних сучасних методів досліджень.	+	+	+
ПР16. Моделювати об'єкти і процеси у живих організмах та їхніх компонентах із використанням математичних методів й інформаційних технологій.	+	+	

7. Схема формування оцінки.

7.1 Форми оцінювання студентів:

семестрове оцінювання:

1. Звіти по практичних роботах: РН 2.1. - 30 балів/10 балів.

2. Самостійна семестрова робота: РН 4.1 - 30 балів/10 балів.

- підсумкове оцінювання у формі диференційованого заліку:

- Письмовий залік: 1 тестове завдання 20 питань по 2 бали (40 балів/0 балів, оцінює РН 1.1).

- Максимальна кількість балів які можуть бути отримані студентом на заліку - 40 балів;

- Для отримання загальної позитивної оцінки з дисципліни оцінка за залік не може бути меншою 24 балів;

- Студент не допускається до заліку, якщо під час семестру набрав менше ніж 20 балів (рекомендований мінімум 36 балів).

Оцінювання	Min	Max
Семестрове оцінювання	36	60
Підсумкове оцінювання	24	40
Всього	60	100

7.2 Організація оцінювання:

Протягом семестру студенти виконують практичні роботи, за результатами чого готують письмові та усні звіти.

Протягом семестру студенти працюють над виконанням самостійної роботи, необхідні знання та навички для виконання якої отримують під час лекційних та практичних занять. Результатом виконання самостійної роботи є висновки та аналіз практичних робіт.

Для студентів, які упродовж семестру не досягли мінімального рубіжного рівня оцінки (36 балів), для одержання допуску до заліку обов'язковим є виконання додаткових завдань.

7.3 Шкала відповідності оцінок

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

8. Структура навчальної дисципліни. Тематичний план лекцій і семінарських / практичних / лабораторних (вибрати необхідне) занять

№ п/п	Назва теми*	Кількість годин		
		лекції	практичні заняття	самостійна робота
<i>Назва розділу чи частини 1 (якщо здійснюється поділ)</i>				
1	<p>Вступ. Тема 1 <i>Обчислювальна хімія як наука. Предмет і головні задачі обчислювальної хімії. Об'єкти досліджень обчислювальної хімії. Програмні пакети, що дозволяють реалізувати дослідження в області обчислювальної хімії. Основи ОС Linux, алгоритми, командний рядок.</i> <i>Практичне заняття: «Знайомство з допоміжним програмним забезпеченням (пз) gaussview та chemcraft, формування завдань для розрахунків»</i></p>	2	2	8
2	<p>Тема 2. <i>Міжмолекулярні взаємодії і сили, які стабілізують низькомолекулярні сполуки та основні класи біополімерів. Методи вивчення міжмолекулярних взаємодій. емпіричні потенціали міжчастинкової взаємодії.</i> <i>Практичне заняття: «Розрахунки енергії та оптимізація молекул отриманих в лб № 1»</i></p>	2	2	9
3	<p>Тема 3. <i>Ab initio моделювання низькомолекулярних сполук та основних класів біополімерів. Методи квантово-хімічного моделювання. ППЕ та коливальний аналіз.</i> <i>Практичне заняття: «Розрахунки енергії дисоціації двохатомних молекул та енергії зв'язків багатоатомних молекул»</i></p>	2	2	9
4	<p>Тема 4. <i>Базисні функції. Різновиди квантово-хімічних методів. Програмні реалізації квантово-хімічного моделювання.</i> <i>Практичне заняття: «Побудова молекулярних орбіталей молекул»</i></p>	2	2	9
5	<p>Тема 5. <i>Перехідні стани, пошук та опис: дослідження за прикладі пакету - Gaussian властивостей молекул та реакцій в газовій фазі та розчині, шляхи протікання реакцій.</i> <i>Практичне заняття: «Сканування поверхні потенційної енергії»</i></p>	2	2	9
6	<p>Тема 6. <i>Внутрішньомолекулярне та міжмолекулярне зв'язування. Теорія атомів у молекулах.</i> <i>Практичне заняття: «Розрахунок порядку зв'язків деяких вуглеводнів»</i></p>	2	2	9

7	Тема 7. Дослідження збуджених станів, конфігураційних простір, ППЕ збуджених станів, дисоціація та молекулярні орбіталі. Практичне заняття: «Розрахунок шляхів хімічних реакцій»	2	2	9
8	ВСЬОГО	14	14	62

*Примітка: слід зазначити також теми, винесені на самостійне вивчення

Загальний обсяг 90 год., в тому числі (вибрати необхідне):

Лекцій – **14 год.**

Практичні заняття - **14 год.**

Самостійна робота - **62 год.**

9. Рекомендовані джерела:

Основна:

1. Давидовська Т.Л., Цимбалюк О.В., Войтешенко І.С., Грабчук Г.П. та ін. Фізика біосистем, КОМПРИНТ, 2016
2. Вакарчук І. О. Квантова механіка : підручник / І. О. Вакарчук. 4-те вид., доп. Львів : ЛНУ імені Івана Франка, 2012. 872 с
3. Foresman J. B. Exploring chemistry with electronic structure methods. 2-nd edition / J. B. Foresman, Æ. Frisch. – Gaussian, Inc., Pittsburg, PA, 1996. – 302 p.
4. J. B. Foresman and Æ Frisch, Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods, 3rd ed., Gaussian, Inc.: Wallingford, CT, 2015. ISBN: 978-1-935522-03-4
5. Richard Bader. Atoms in Molecules: A Quantum Theory. — USA: Oxford University Press, 1994. — ISBN 978-0-19-855865-1.
6. Ричард Бейдер. Атомы в молекулах. Квантовая теория. — М.: Мир, 2001. — 532 с. — ISBN 5-03-003363-7.
7. Соловьев М. М. Компьютерная химия / М. М. Соловьев, М. Е. Соловьев. – М. : Солон-пресс, 2005 . – 536 с.
8. Минкин В. И. Теория строения молекул / В. И. Минкин, Б. Я. Симкин, Р. М. Миняев. – Ростов н/Д : Феникс, 1997. – 560 с.
9. Минкин В. И. Квантовая химия органических соединений. Механизмы реакций / В. И. Минкин, Б. Я. Симкин, Р. М. Миняев. – М. : Химия, 1986. – 412 с.
10. Степанов Н. Ф. Квантовая механика и квантовая химия / Н. Ф. Степанов. – М. : Мир, 2001. – 519 с.
11. Бандура Л. В. Неэмпирические расчеты кристаллов в атомном базисе с использованием интернет-сайтов и параллельных вычислений / А. В. Бандура, Р.А.Эварестов. — СПб. : Изд-во СПбГУ, 2004.
12. Блохинцев Д. И. Основы квантовой механики /Д. И. Блохинцев. — М. Лань, 2004.
13. Бутырская Е.В. Компьютерная химия: Основы теории и работа с программами GAUSSIAN и GAUSSVIEW. Солон-пресс, 2011. -224 с.

Додаткова:

1. The official Gaussian website <http://www.gaussian.com/index.htm>
2. The official ORCA <http://www.orcaforum.kofo.mpg.de>
3. The official AIMALL website <http://aim.tkgristmill.com>
4. The official GAMESS website <https://www.msg.chem.iastate.edu/gamess/>
5. The official MULTIWFN website <http://sobereva.com/multiwfn/>
6. Ochterski Joseph W. Thermochemistry in Gaussian. Gaussian, Inc. 2000 –19 p.
7. Кантор Ч., Шиммел П. Биофизическая химия. - М.: Мир. 1984-1985. - Т. 1-3.
8. Романовский Ю.М., Степанова М.В., Чернавский Д.С. Математическая биофизика. - М.: Наука. 1984.
9. Васильев А.Н. Python на примерах. Практический курс по программированию. Издательство: "Наука и Техника", Санкт-Петербург, 2016 рік, 432 с.
10. Васильев А.Н. Самоучитель Matlab. Практический подход. Издательство: "Наука и Техника", Санкт-Петербург, 2012 рік, 448 с.
11. The Linux Documentation Project <http://www.tldp.org/>