

Код та назва дисципліни	1-E3-102-2-08_Квантово-хімічне моделювання спектральних характеристик лікарських речовин/Quantum-chemical modelling of spectral characteristics of drug compounds
Рекомендується для галузі знань (спеціальності, освітньої програми)	Для всіх спеціальностей галузей знань А4, Е3, G1, G13, І6
Кафедра	Фізичної, органічної та неорганічної хімії
П.І.П. НПП (за можливості)	Оковитий Сергій Іванович
Рівень ВО	перший (бакалаврський)
Курс, семестр (на якому буде викладатись)	3-4 курс
Мова викладання	українська
Пререквізити (передумови вивчення дисципліни)	Знання «Неорганічної хімії», «Фізичної та колоїдної хімії», «Органічної хімії»
Чому це цікаво/треба вивчати	Можливість застосовувати отримані знання до біологічних, неорганічних та органічних систем. Допомогає передбачати властивості нових матеріалів ще до їх синтезу. Дозволяє розуміти вплив структури речовини на її спектральні характеристики Економить ресурси на експериментальні дослідження. Знайомить із сучасними підходами до комп'ютерного моделювання спектральних характеристик речовин за допомогою квантово-хімічних методів Перспективи роботи в науково-дослідних підрозділах та аналітичних лабораторіях
Перелік тем з дисципліни	Основи квантової хімії та моделювання. Роль моделювання в хімії. Основні типи спектрів. Аб-ініціо, напівемпіричні, DFT-методи (теорія функціоналу густини). Порівняння точності та обчислювальних витрат. Оптимізація геометрії. Конформаційний аналіз. Обчислення та інтерпретація спектральних характеристик. Моделювання інфрачервоних (ІЧ) спектрів. Вплив симетрії та структурних факторів. Раман-спектроскопія в квантово-хімічному моделюванні. Принципи, селективність, аналіз розрахованих спектрів. УФ-видима спектроскопія (електронні переходи). Теорія збуджених станів. TD-DFT метод у моделюванні спектрів. ЯМР-спектроскопія (ядерний магнітний резонанс). Розрахунок хімічних зсувів і спин-спінової взаємодії. Порівняння з експериментальними даними. Практичне застосування та програмне забезпечення. Огляд програмного забезпечення для квантово-хімічного моделювання. Gaussian, ORCA, NWChem, Avogadro, GaussView. Складання вхідних файлів, запуск розрахунків, аналіз вихідних даних. Побудова молекулярних структур і підготовка до моделювання. Оптимізація геометрії, обчислення зарядів, симетрія. Калібрування методів і валідація

	результатів. Порівняння з експериментом. Аналіз похибок та вибір функціоналів. Проектне моделювання: інтерпретація спектрів складних молекул. Аналіз реального об'єкта (органічна, неорганічна, біоактивна сполука). Підготовка міні-дослідження.
Як можна користуватися набутими знаннями і уміннями (компетентності)	Розуміння основ квантової хімії та методів обчислення енергетичних рівнів і спектрів. Здатність обирати адекватні квантово-хімічні методи для розв'язання конкретних задач. Здатність до роботи з програмними пакетами для моделювання спектрів. Здатність інтерпретувати спектральні дані. Здатність порівнювати розрахункові і експериментальні результати. Здатність розв'язувати спеціалізовані задачі та практичні проблеми в різних галузях хімії
Очікувані результати навчання	Знати методи моделювання спектрів (електронних, коливальних, ядерного магнітного резонансу) для встановлення структури сполук та йонних асоціатів. Вміти оптимізувати методики кількісного аналізу речовин. Пояснювати принципи квантово-хімічних методів, що використовуються для моделювання спектральних характеристик речовин. Вміти розраховувати та інтерпретувати спектри (ІЧ, ЯМР, електронні, Раман тощо) з використанням відповідного програмного забезпечення. Аналізувати вплив структури речовини на її спектральні властивості.
Інформаційне забезпечення	Методичні матеріали, лекції, презентації 1. Оковитий, С.І., Бондаренко Я.С. Лабораторний практикум із дисципліни «Теоретичне моделювання динаміки хімічних систем». – Д: РВВ ДНУ, 2012. (друк) 2. Оковитий С.І., Бондаренко Я.С. Лабораторний практикум із дисципліни «Комп'ютерне моделювання хімічних систем» – Д: РВВ ДНУ, 2012. (друк) 3. Оковитий С.І. Борисенко І.О. Квантово-хімічне дослідження структури та реакційної здатності хімічних сполук. Методичні рекомендації до виконання лабораторних робіт – Д.: РВВ ДНУ, 2021. (друк, сайт ф-ту)
Види навчальних занять (лекції, практичні, семінарські, лабораторні заняття тощо)	Лекції, лабораторні заняття
Вид семестрового контролю	диференційований залік
Максимальна кількість здобувачів/ Мінімальна кількість здобувачів (для мовних та творчих дисциплін)	Без обмежень