

Комп'ютерне моделювання фізико-хімічної поведінки органічних сполук та полімерів

Анотація. Дисципліна «Комп'ютерне моделювання фізико-хімічної поведінки органічних сполук та полімерів» належить до переліку дисциплін вільного вибору аспіранта. В даній дисципліні розглянуто приклади порівняння результатів експерименту в полімерній та органічній хімії та результати їх комп'ютерного моделювання. Розглянуто комп'ютерні програми необхідні для моделювання експерименту та спектральних даних. Наведено приклади користування цими програмами в кожному конкретному випадку.

Кількість кредитів: 4

Викладач: Колендо Олексій Юрійович, д.х.н., проф.

Мета навчальної дисципліни:

Засвоєння аспірантом практичних навичок з

- комп'ютерного моделювання в полімерній та органічній хімії.

Попередні вимоги:

Аспірант повинен знати: органічну та полімерну хімію на рівні випускника магістратури Київського національного університету імені Тараса Шевченка.

Аспірант повинен вміти: використовувати комп'ютерні програми на рівні випускника магістратури Київського національного університету імені Тараса Шевченка.

Змістові модулі:

1. Програми для квантовохімічних розрахунків
2. Побудова вихідних сполук для подальших розрахунків
3. Оптимізація геометрії вихідних сполук.
4. Квантовохімічна симуляція спектрів.
5. Інші квантовохімічні розрахунки.
6. Оформлення результатів розрахунків

Мова викладання: українська, російська, польська

Місце у структурно-логічній схемі: ДВА.3.02.15, читається на другому році навчання

Термін вивчення: дисципліна вивчається на 2 році навчання за освітньо-науковим рівнем "доктор філософії" в обсязі 120 годин. (18 год. – лекційні заняття, 4 год. – практичні заняття, 2 год. консультації), 96 години самостійної роботи.