

Квантово-хімічні розрахунки органічних сполук

Анотація. Дисципліна «Квантово-хімічні розрахунки органічних сполук» належить до переліку дисциплін вільного вибору аспіранта. В даній дисципліні докладно розглянуто квантово-хімічні розрахунки просторової та електронної будови органічних молекул, розрахунки енергії конформацій та поверхонь потенціальної енергії реакцій, геометрії та відносної стабільності короткоживучих проміжних продуктів та перехідних станів; врахування ефектів міжмолекулярних взаємодій, зокрема, сольватації в квантово-хімічних розрахунках. Розглянуто застосування квантово-хімічних розрахунків для визначення спектроскопічних параметрів молекул.

Кількість кредитів: 4.

Викладач: Пивоваренко Василь Георгійович, д.х.н., проф.

Мета навчальної дисципліни:

Розвиток та закріплення теоретичних та практичних навичок квантово-хімічних розрахунків геометрії органічних сполук та активаційних бар'єрів хімічних процесів.

Попередні вимоги:

Аспірант повинен знати: основні прийоми та базове програмне забезпечення для квантово-хімічних розрахунків органічних сполук на рівні випускника магістратури Київського національного університету імені Тараса Шевченка.

Аспірант повинен вміти: застосовувати базове програмне забезпечення для квантово-хімічних розрахунків геометрії органічних сполук та активаційних бар'єрів хімічних процесів (програма квантово-хімічних розрахунків "MOPAC") на рівні випускника магістратури Київського національного університету імені Тараса Шевченка.

Змістові модулі:

1. програмне забезпечення для квантово-хімічних розрахунків органічних сполук Hyperchem та MOPAC;
2. квантово-хімічні розрахунки геометричної та електронної будови органічних молекул;
3. квантово-хімічні розрахунки поверхонь потенціальної енергії реакцій;
4. квантово-хімічні розрахунки геометрії та відносної стабільності короткоживучих проміжних продуктів та перехідних станів;
5. врахування ефектів сольватації в квантово-хімічних розрахунках органічних реакцій;
6. застосування квантово-хімічних розрахунків для прогнозування спектральних властивостей органічних сполук.

Мова викладання: Українська та, в разі необхідності, англійська.

Місце у структурно-логічній схемі: ДВА.3.02.08, читається на другому році навчання

Термін вивчення: дисципліна вивчається на 2 році навчання за освітньо-науковим рівнем "доктор філософії" в обсязі 120 годин, у тому числі 24 годин аудиторних занять (18 год. – лекційні заняття, 4 год. – практичні заняття, 2 год. консультації), 96 години самостійної роботи.