

Фізика молекулярних систем

Анотація: Курс фізики молекулярних систем дозволяє оволодіти знаннями про будову, властивості, механізми взаємодії та енергетичного обміну молекулярних систем. Особлива увага приділяється освоєнню сучасних методів квантово-хімічних розрахунків та програмних пакетів, де вони реалізуються.

Кількість кредитів: 4

Викладач: Дмитренко Оксана Петрівна, доктор фіз.-мат. наук, доцент кафедри фізики функціональних матеріалів.

Мета навчальної дисципліни: оволодіння аспірантами в повному обсязі знаннями про будову, властивості, механізми взаємодії молекулярних систем та отримання навичок використання сучасних програмних пакетів у фізиці молекулярних систем.

Попередні вимоги:

Аспірант повинен знати:

- механізми молекулярних та міжмолекулярних взаємодій.
- фізичні основи будови та функціонування біомолекул, механізми міграції енергії в біоструктурах.
- фізику білків, нуклеїнових кислот та ферментів.
- конформаційні властивості макромолекул.
- механізми взаємодії між макромолекулами у розчині, кінетику ферментативних реакцій.

Аспірант повинен вміти:

- використовувати фізичні методи дослідження молекулярних систем.
- застосовувати сучасні методи квантово-хімічних розрахунків електронних властивостей органічних молекул, в тому числі метод Хартрі-Фока, молекулярних орбіталей, конфігураційної взаємодії, електронної кореляції.
- користуватися сучасними програмами для розрахунків електронних характеристик молекул в основному і збудженому станах.

Теми:

- Тема 1. Механізми молекулярних та міжмолекулярних взаємодій.
- Тема 2. Фізичні методи дослідження молекулярних систем.
- Тема 3. Фізичні основи будови та функціонування біомолекул, механізми міграції енергії в біоструктурах.
- Тема 4. Фізика білків, нуклеїнових кислот та ферментів.
- Тема 5. Конформаційні властивості макромолекул.
- Тема 6. Механізми взаємодії між макромолекулами у розчині, кінетика ферментативних реакцій.
- Тема 7. Сучасні методи квантово-хімічних розрахунків.
- Тема 8. Сучасні програми для розрахунків електронних характеристик молекул в основному і збудженому станах.

Мова викладання: українська.

Місце у структурно-логічній схемі: ДВА.3.02.20 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 48 годин аудиторних занять (36 год. – лекційні заняття, 8 год. – практичні заняття, 4 години – консультація), 72 годин самостійної роботи.