

"ЗАТВЕРДЖУЮ"



Проректор з науково-педагогічної
роботи

Олександр ГОЛОВКО

2022 р.

Робоча програма навчальної дисципліни

Фізико-хімічні основи біологічних процесів та методи їх досліджень
(Квантова хімія)

(назва навчальної дисципліни)

рівень вищої освіти перший (бакалавр)

галузь знань 10 – "Природничі науки"

спеціальність 105 – "Прикладна фізика та наноматеріали"

освітня програма освітньо-професійна програма "Біомедичні нанотехнології"

вид дисципліни вибіркова

факультет ННІ «Фізико-технічний факультет»

2022 / 2023 навчальний рік

Програму рекомендовано до затвердження вченовою радою ННІ «Фізико-технічний факультет»
“26” серпня 2022 року, протокол № 8

РОЗРОБНИКИ ПРОГРАМИ:

Вус Катерина Олександрівна, кандидат фізико-математичних наук, доцент кафедри медичної фізики та біомедичних нанотехнологій

Програму схвалено на засіданні кафедри медичної фізики та біомедичних нанотехнологій
Протокол від 26 серпня 2022 року, № 7

Завідувачка кафедри медичної фізики та біомедичних нанотехнологій


(підпис)

Валерія ТРУСОВА

Програму погоджено з гарантом освітньо-професійної програми "Біомедичні нанотехнології"

Гарант освітньо-професійної програми "Біомедичні нанотехнології"


(підпис)

Ольга ЖИТНЯКІВСЬКА

Програму погоджено науково-методичною комісією ННІ «Фізико-технічний факультет»

Протокол від “30” серпня 2022 року № 11

Голова методичної комісії ННІ «Фізико-технічний факультет»


(підпис)

Микола ЮНАКОВ

ВСТУП

1. Опис навчальної дисципліни

Робочу програму навчальної дисципліни «Квантова фармакологія» укладено відповідно до вимог стандарту вищої освіти України: перший (бакалаврський) рівень, галузь знань 10 – «Природничі науки», спеціальність 105 – «Прикладна фізика та наноматеріали», затвердженого і введеного в дію наказом Міністерства освіти і науки України від 16.06.2020 р. № 804.

Навчальна дисципліна «Квантова фармакологія» є необхідною складовою циклу професійної підготовки фахівців першого освітньо-кваліфікаційного рівня «бакалавр». Дисципліна використовує засади квантової механіки для інтерпретації явищ, що протікають в атомах, молекулах та твердих тілах з використанням сучасних програм обчислення та візуалізації та є міждисциплінарною галуззю науки. Вивчення дисципліни «Квантова хімія» є фундаментом сучасної прикладної фізики та хімії, засвоєння якої дозволяє студентам як майбутнім сучасним фахівцям і адаптуватися і орієнтуватися в швидких змінах наукових високих технологіях.

1.1. Метою викладання навчальної дисципліни є оволодіння теоретичними основами та практичними навичками користування квантово-хімічних розрахунків, ознайомлення із сучасними методами розрахунку структури і властивостей молекул та речовин за допомогою методів сучасної квантової хімії, формування системи практичних умінь з використанням основних методів квантової хімії в різних програмних пакетах.

1.2. Основні завдання вивчення дисципліни:

- засвоєння та вміння використовувати теоретичні навички для самостійного вирішення науково-дослідних та практичних задач, основних понять квантової механіки, математичного апарату квантової хімії;
- вивчення теорії молекулярного зв'язку, основних положень методу молекулярних орбіталей;
- засвоєння доступних пакетів квантово-хімічних комп’ютерних програм;
- вивчення і розуміння методів дослідження структури молекул, їх симетрії та методів ідентифікації сполук;
- характеризація структури молекул різного складу та молекулярних механізмів їх комплексоутворення.

Вивчення дисципліни «Квантова фармакологія» спрямовано на забезпечення таких загальних (ЗК) та фахових компетентностей (ФК) за спеціальністю, затвердженого Стандартом вищої освіти:

ЗК 1. Здатність застосовувати знання у практичних ситуаціях

ЗК 2. Знання та розуміння предметної області та розуміння професійної діяльності

ЗК 9. Здатність працювати автономно

ФК 5. Здатність до постійного розвитку компетентностей у сфері прикладної фізики, інженерії та комп’ютерних технологій

ФК 8. Здатність працювати в колективах виконавців, у тому числі в міждисциплінарних проектах

ФК 10. Здатність виконувати обчислювальні експерименти, використовувати чисельні методи для розв’язування фізичних задач і моделювання фізичних систем

ФК 12. Здатність використовувати комп’ютерне моделювання для дизайну біонанотехнологічних об’єктів із заданими властивостями (зокрема, лікарських

засобів та їх нанотранспортерів, нанорозмірних візуалізуючих агентів для медичної діагностики)

1.3. Кількість кредитів: 5

1.4. Загальна кількість годин: 150

1.5. Характеристика навчальної дисципліни	
Нормативна	
Денна форма навчання	
Рік підготовки	
4-й	
Семестр	
7-й, 8-й	
Лекції	
30 год.	
Практичні заняття	
32 год.	
Самостійна робота	
88 год.	

1.6 Заплановані результати навчання

Очікувані результати навчання відповідають програмним результатам навчання ОП «Біомедичні нанотехнології» за спеціальністю 105 – «Прикладна фізика та наноматеріали»:

ПРН-2. Знати цілі сталого розвитку та можливості своєї професійної сфери для їх досягнення, в тому числі в Україні

ПРН-3. Розуміти закономірності розвитку прикладної фізики, її місце в розвитку техніки, технологій і суспільства, у тому числі в розв'язанні екологічних проблем

ПРН-4. Знати, розуміти та вміти застосовувати основні положення загальної та теоретичної фізики, зокрема, класичної, релятивістської та квантової 10 механіки, механіки суцільних середовищ, молекулярної фізики та термодинаміки, електромагнетизму, хвильової та геометричної оптики, фізики атома та атомного ядра для встановлення, аналізу, тлумачення, пояснення й класифікації суті та механізмів різноманітних фізичних явищ і процесів для розв'язування складних спеціалізованих задач та практичних проблем з теоретичної та прикладної фізики

ПРН-5. Знати і розуміти експериментальні основи фізики: аналізувати, описувати, тлумачити та пояснювати основні експериментальні підтвердження існуючих фізичних теорій

ПРН-6. Застосовувати сучасні математичні методи для побудови й аналізу математичних моделей фізичних процесів

ПРН-7. Застосовувати ефективні технології, інструменти та методи експериментального дослідження властивостей речовин і матеріалів, включаючи наноматеріали, при розв'язанні практичних проблем прикладної фізики

ПРН-8. Застосовувати фізичні, математичні та комп'ютерні моделі для дослідження фізичних явищ, розробки приладів і наукових технологій ПРН-5. Знати і розуміти експериментальні основи фізики: аналізувати, описувати, тлумачити та пояснювати основні експериментальні підтвердження існуючих фізичних теорій

ПРН-9. Вибирати ефективні методи та інструментальні засоби проведення досліджень у галузі прикладної фізики

ПРН-10. Відшуковувати необхідну науково-технічну інформацію в науковій літературі, електронних базах, інших джерелах, оцінювати надійність та релевантність інформації

ПРН-11. Класифікувати, аналізувати та інтерпретувати науково-технічну інформацію в галузі прикладної фізики

ПРН-12. Мати навички роботи із сучасною обчислювальною технікою, вміти використовувати стандартні пакети прикладних програм і програмувати на рівні, достатньому для реалізації чисельних методів розв'язування фізичних задач, комп'ютерного моделювання фізичних явищ і процесів, виконання обчислювальних експериментів

ПРН-19. Мати базові навички проведення теоретичних та/або експериментальних наукових досліджень з окремих спеціальних розділів фізики, що виконуються індивідуально (автономно) та/або у складі наукової групи

ПРН-20. Знати і розуміти основні вимоги техніки безпеки при проведенні експериментальних досліджень, зокрема правила роботи з певними видами обладнання та речовинами, правила захисту персоналу від дій різноманітних чинників, небезпечних для здоров'я людини

Зокрема, відповідно до вимог ОКХ бакалавра прикладної фізики та наноматеріалів, студенти будуть:

знати та розуміти: а) основні методи квантово-механічного обчислення структури і властивостей молекул та кристалів; б) квантові теорії утворення хімічного зв'язку; в) основні програмні пакети, що використовуються для проведення квантово-хімічних розрахунків, г) характеристики, що визначають електронні, обертальні та коливальні стани молекул та їх відносних енергіях як джерела інформації щодо молекулярної структури.

вміти: а) застосовувати спеціальне програмне забезпечення для розв'язання задач квантової хімії; б) включати отримані знання у вже існуючу систему знань і застосовувати їх в самостійних розробках; в) самостійно планувати проведення досліджень з використанням алгоритмів та методів квантової хімії; г) генерувати нові плідні науково-технічні і інноваційні ідеї для реалізації задач квантової хімії.

2. Тематичний план навчальної дисципліни

Тема 1. Основні постулати квантової механіки

Основні принципи та постулати квантової механіки. Поняття хвильової функції. Електромагнітне випромінювання. Гіпотези Планка, де Броїля. Принципи суперпозиції станів. Фотоефект. Тиск світла. Ефект Комптону. Хвильова механіка Шредінгера, принцип невизначеності Гейзенберга

Тема 2. Молекулярна задача квантової хімії

Стационарне рівняння Шредінгера. Розв'язок рівняння Шредінгера. Електронна та ядерна задачі. Адіабатичне наближення. Загальна структура потенціальних кривих та поверхонь потенційної енергії. Принцип тотожності частинок. Класифікація атомних орбіталей та атомні терми. Теорія молекули гелію

Тема 3. Геометрична будова молекул. Молекулярні орбіталі та молекулярний зв'язок

Основи теорії МО ЛКАО. Канонічні та локалізовані молекулярні орбіталі. Теорія відштовхування електронних пар (теорія ВЕПВО). Гіbridизація. Терми станів багатоатомних молекул. Метод валентних зв'язків. Характеристика σ - та π -орбіталей. Полярний зв'язок

Тема 4. Симетрія молекул та молекулярних орбіталей

Точкова теорія симетрії для опису електронної будови багатоатомних молекул. Визначення симетрії. Елементи та операції симетрії. Точкові групи: номенклатура, класифікація, види. Збереження орбітальної симетрії в хімічних реакціях. Симетрія реагентів і продуктів реакції. Кореляційні діаграми. Роль кореляційних діаграм у теорії узгоджених реакцій. Правила Вудворда-Хофмана. Правила відбору. Таблиці характерів

Тема 5. Молекулярний іон водню

Електронне рівняння Шредінгера для молекулярного іона водню. Тип зв'язку в молекулярному іоні водню. Орбітальні енергії та орбітальні коефіцієнти. Розрахунок залежності повної енергії та її компонент. Склад молекулярного іона водню. Допущення Борна-Оппенгеймера і оператор Гамільтона для повної енергії системи. Інтеграл перекриття, залежність від між'ядерної відстані. Кулонівський та резонансний інтеграли. Якісний аналіз станів двохатомних молекул. Енергетична діаграма МО. Опис властивостей двохатомних молекул

Тема 6. Метод Хартри-Фока

Електронна енергія молекулярної системи в однодетермінантном наближенні. Функціонал енергії. Рівняння Хартри-Фока. Неканоничні та каноничні рівняння Хартри-Фока. Рівняння, що визначають просторові одноелектронні функції в обмеженом та необмеженом варіантах методу Хартри-Фока

Тема 7. Напівемпіричні методи квантової хімії

Валентне наближення. Наближення нульового диференціального перекривання. Основні положення методу Хюккеля. π -електронне наближення. Електронна структура лінійних та цикліческих поліенів. Розподілення електронів в молекулах. Правило ароматичності. Антиароматичність. Електронна будова альтернативних вуглеводнів. Індекси реакційної здатності. Елементи і операції симетрії. Класифікація типів симетрії молекулярних орбіталей простих спряжених молекул

Тема 8. Розподілення електронної густини молекул

Аналіз функції електронної густини: підходи Малликена і Бейдера. Заселеності і заряди ефективних атомів в молекулі. Апроксимація функції електронної густини в багатодетермінантном наближенні. Натуральні орбіталі. Використання матриць густини різних порядків для отримання різних вкладів в електронну енергію системи. Енергія електрон-ядерної взаємодії як функціонал електронної густини

3. Структура навчальної дисципліни

Назви розділів і тем	Кількість годин			
	денна форма			у тому числі
	усього	л	п	
1	2	3	4	5
Тема 1		3	4	11
Тема 2		4	4	11
Тема 3		3	4	11
Тема 4		4	4	11
Тема 5		4	4	11
Тема 6		4	4	11
Тема 7		4	4	11
Тема 8		4	4	11
Усього годин	150	30	32	88

4. Теми практичних занять

	Назва теми	Кількість годин
1.	Загальна характеристика та огляд основних квантово-хімічних програм	3
2.	Підготовка молекули до квантово-хімічних розрахунків	2
3.	Структурні та енергетичні властивості двухатомних молекул	2
4.	Оптимізація геометрії. Алгоритми оптимізації	2
5.	Визначення точності розрахунків зарядового розподілення на основі розрахунків дипольного моменту	2
6.	Сканування поверхні потенціальної енергії у програмі GAUSSIAN	2
7.	Аналіз хімічних реакцій у середовищі GAUSSIAN. Розрахунок ентальпії реакцій та енергії Гіббса	2
8.	Ab initio розрахунки у межах програмного пакету GAMESS	2
9.	Розрахунок електронних, спектральних та магнітних характеристик молекули кисню у рамках різних розрахункових схем пакету GAMESS	2
10.	Порівняльний аналіз квантово-хімічні розрахунки молекул фармацевтичних препаратів в різних програмних пакетах	3
11.	Квантово-хімічний розрахунок спектрів молекул органічних барвників напівемпіричним методом ZINDO/S	2
12.	Імітаційне моделювання процесу утворення фулеренів методами квантової хімії	2
13.	Розрахунок координат реакції у програмі МОРАС	2
14.	Особливості розрахунку конфігураційної взаємодії у програмі МОРАС	2
15.	Дослідження стабільності станів амінокислот в газовій фазі	2
Разом		32

5. Завдання для самостійної роботи

	Назва теми	Кількість годин
1.	Математичний апарат квантової механіки	6
2.	Одновимірний рух. Задача про гармонічний осцилятор	6
3.	Стационарна та залежна від часу теорії збурень	6
4.	Локалізовані та нелокалізовані орбіталі, біоорбіталі та електронна структура молекул	6
5.	Енергія дисоціації	6
6.	Вплив розчинника на реакційну здатність молекул	6
7.	Міжмолекулярне відштовхування та адіабатичне наближення	6
8.	Опис коливань молекул у гармонічному наближенні. Симетрія молекулярних орбіталей.	6
9.	Простий метод. Метод валентних зв'язків для багатоатомних молекул	6
10.	Квантово-хімічний аналіз міжмолекулярних взаємодій	6
11.	Квантова наноелектроніка	6
12.	Квантово-хімічні розрахунки фулеренів, фулеритів та	5

	углеводневих нанотрубок	
13.	Квантовомеханічний аналіз гібридізації атомних орбіталей	6
14.	Неелектростатичні вклади до вільних енергій. Використання молекулярного моделювання для відкриття нових молекул	6
15.	Розрахунок УФ- та ІЧ-спектрів напівемпіричними методами	5
	Разом	88

6. Методи контролю

Поточний контроль на практичних заняттях. Виконання контрольних робіт, виконання домашніх завдань. Письмовий залік в 7 семестрі, письмовий екзамен в 8 семестрі.

7. Схема нарахування балів

7-й семестр

Домашні завдання	Практичні завдання	Контрольна робота	Залік	Сума
16	24	20	40	100

8-й семестр

Домашні завдання	Практичні завдання	Контрольна робота	Екзамен	Сума
16	24	20	40	100

- Для допуску до підсумкового семестрового контролю студент повинен виконати всі розрахункові роботи, домашні завдання, виконати (дистанційно або письмово) контрольну роботу.
- Рейтингожної роботи, термін її виконання та подання оформлені робіт визначається викладачем, який веде практичні заняття.
- Семестровий залік вважається зданим, якщо сума балів за залік ≥ 10 балів. Якщо сума отриманих студентом на заліку балів виявляється меншою ніж 10, необхідно перескладання заліку.
- Семестровий екзамен вважається складеним, якщо сума балів за екзамен ≥ 10 балів.

Шкала оцінювання

Сума балів за всі види навчальної діяльності протягом семестру	Оцінка заліку/екзамену	Оцінка екзамену
90 – 100		відмінно
70 – 89	зараховано	добре
50 – 69		задовільно
1 – 49	не зараховано	незадовільно

8. Методичне забезпечення

1. Робоча програма навчальної дисципліни.
2. Підручники, навчальні посібники.

9. Рекомендована література

1. Слєта Л.О., Іванов В.В. Квантова хімія - Харків: Гімназія, 2008. - 443 с.
2. Юхновський І.Р. Основи квантової механіки - К.:с.Либідь, 2002. - 390 с.
3. Вакарчук І.О. Квантова механіка - Львів: ЛНУ ім. І. Франка, 2004. - 784 с.
4. Yong D. C. Computational Chemistry, Wiley Interscience. New York, 2001. 370 p.
5. Quantum Biochemistry, edited by C.F. Matta. – Weinheim: Wiley, 2010. – 920 p.
6. Quantum Effects in Biology, edited by M. Mohseni. – Cambridge University Press, 2014. – 415 p.
7. Черановський В.О., Іванова К.Ф. Основи будови речовини. Навчальний посібник для студентів хімічного факультету – Харків: ХНУ, 2004. – 93 с.
8. L. Piela. Ideas of Quantum Chemistry – Oxford: Elsevier Science & Technology, 2013. – 1330 p.
9. Jensen, Frank. Introduction to computational chemistry. – New York: Wiley, 1999. – 429 pp.
10. Фізична хімія. Хімічна термодинаміка: навч. посіб. для студ.– Київ: КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2021. – 257 с.

10. Додаткова література

1. Квантова хімія: медико-фармацевтичний аспект (монографія) / Чекман І.С., Сирова Г.О., Казакова О.О. та ін. – Х.: ТОВ «Планета-принт», 2017. – 139 с.
2. Чекман І.С. Квантова фармакологія. – Вид-во «Наукова думка». –2012. –178 с.
3. Лебідь В.І. Фізична хімія. – Харків: Фоліо, 2005. – 478 с.
4. Coosky A. Physical Chemistry: Quantum Chemistry and Molecular Interactions. – Pearson, 2014. – 603 p.
5. Яцимирський В., Яцимирський А. Квантова хімія. – К.: ВПЦ «Київський університет», 2009. – 479 с.
6. Levine I. N. Quantum Chemistry. – 7th ed. – Pearson, 2014. – 714 p.
7. <http://vergil.chemistry.gatech.edu/notes/>
8. <http://www.psicode.org/>
9. <https://pymol.org/>
10. <https://www.msg.chem.iastate.edu/GAMESS/documentation.html>