

Faculty Development Programme
on
“Computational Chemistry: Theory and Practice”
24th May 2025

Faculty Development Programme (FDP)

Title of the Session: *Computational Chemistry: Theory and Practice*

Venue: KBN College

Resource Person:

Prof. Mahesh Rawa

Associate Professor,
Department of Chemistry,
R.M. University, Andhra Pradesh

Overview:

As part of the Faculty Development Programme at KBN College, an enlightening session on **Computational Chemistry Theory and Practice** was conducted by **Prof. Mahesh Rava**. The session focused on bridging theoretical chemistry with computational applications, enhancing faculty understanding of digital tools in chemical research.

Theory Component:

Prof. Rava began the session with a comprehensive introduction to **computational chemistry**, covering:

- **Basic Principles:** Quantum mechanics, molecular orbitals, Schrödinger equation.
- **Computational Methods:** Ab initio, semi-empirical, and density functional theory (DFT).
- **Molecular Modeling Techniques:** Geometry optimization, energy calculations, and molecular properties.
- **Applications in Research:** Drug discovery, material design, and reaction mechanisms.

The theoretical framework emphasized the relevance of computational approaches in modern chemistry and how they serve as predictive tools to support experimental outcomes.

Practical Component:

The hands-on part of the session involved:

- **Software Demonstration:** Introduction to tools such as Gaussian, ORCA, and Avogadro for molecular modeling.
- **Live Simulation:** Real-time demonstrations of molecule building, energy minimization, and visualizing electron density.

- **Case Study:** Participants analyzed a simple organic molecule using computational methods to predict its reactivity and stability.
- **Discussion:** Troubleshooting common issues in simulations and data interpretation.

Prof. Rava guided participants step-by-step, making the complex procedures accessible and practical.

Outcome:

The session empowered faculty with:

- A clear understanding of the integration of computational tools in chemical education and research.
- Practical skills in using software for molecular analysis and simulation.
- Motivation to incorporate computational experiments into student projects and academic research.

Conclusion:

The FDP session by Prof. Mahesh Rava was a valuable blend of theory and hands-on training. It significantly contributed to the professional development of faculty by introducing them to the frontier tools of computational chemistry. The participants expressed appreciation for the depth and clarity of the session, marking it as one of the highlights of the FDP programme.

Let me know if you'd like this formatted for a newsletter, presentation slide, or official report submission.

Photos

ISO 9001-2015 CERTIFIED

KAKARAPARTI BHAVANARAYANA COLLEGE

(Sponsored by S.K.P.V.V. Hindu High Schools' Committee), Kothapeta, Vijayawada - 520 001.

NAAC 'A++' GRADE CYCLE 4

SKPVV INSTITUTIONS

Faculty Development Programme on
"Computational Chemistry"

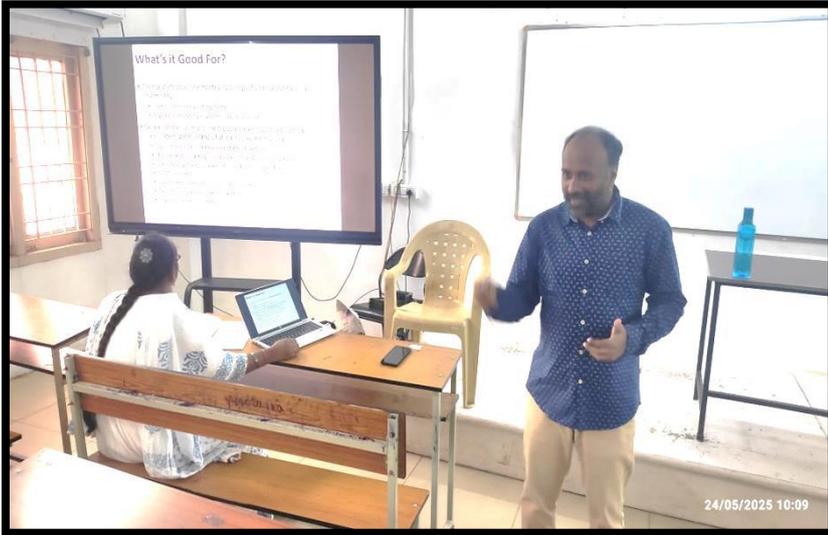
24th May, 2025 @ 09.30 A.M.

Venue: NB2
 Resource Person

Dr. Mahesh Kumar Rawa
 Asst. Dean (Research), Associate Professor,
 Dept. of Chemistry, SRM University-A.P.

Organized by
Department of CHEMISTRY

In Association with
Research & Development Cell



Paper Clippings



కంప్యూటేషనల్ కెమిస్ట్రీతో నాణ్యమైన పరిశోధనలు

విజయవాడ పశ్చిమ, సెల్ ఐటి

న్యూస్:- విజయవారి ప్రయోగాల కోసం అవసరమైన ఖరీదైన రసాయన పదార్థాలు, సామగ్రి అవసరం లేకుండా సాఫ్ట్వేర్లో మోడలింగ్ ద్వారా నాణ్యమైన పరిశోధనలు చేయడం కంప్యూటేషనల్ కెమిస్ట్రీ ద్వారా సాధ్యమవుతుందని ఎన్.ఆర్.ఎం. విశ్వవిద్యాలయం రసాయనశాస్త్ర విభాగం ఆసోసియేట్ ప్రొఫెసర్ డాక్టర్ మహేశ్ కుమార్ రావ్ అన్నారు. కె.వి.ఎస్. కళాశాల రసాయనశాస్త్ర విభాగం, రీసెర్చ్ సెల్ సంయుక్త నిర్వహణలో బుధవారం 'కంప్యూటేషనల్ కెమిస్ట్రీ' అంశంపై ఫ్యాకల్టీ డెవలప్ మెంట్ ప్రోగ్రాం

జరిగింది. ముఖ్య అతిథిగా సాల్టాన్ని మహేశ్ కుమార్ మాట్లాడుతూ, కెమిస్ట్రీ, కంప్యూటర్ సైన్స్ మేళవింపుతో ఏర్పడిన రసాయనిక పరిశోధన విభాగమే కంప్యూటేషనల్ కెమిస్ట్రీ అని, దీనిద్వారా అణువు స్థాయిలో జరిగే మార్పులను సైతం స్పష్టంగా అర్థం చేసుకోవచ్చన్నారు. డ్రగ్ డిజైన్లో మాచికక్కాళ్లను మోడలింగ్ చేసి, తక్కువ నమయంలో ప్రభావవంతమైన మందులను ఆభివృద్ధి చేయవచ్చన్నారు. ల్యాబ్లో జరిగే సుదీర్ఘ ప్రయోగాల కన్నా కంప్యూటర్ సిమ్యులేషన్ ద్వారా వేగంగా ఫలితాలను పొందవచ్చన్నారు. పారిశ్రామిక రసాయనాలు పరిసరాలపై చూసే ప్రభావాన్ని ముందుగానే అంచనా వేయటం సాధ్యమవుతుందన్నారు. ట్రిస్నిపాల్ డాక్టర్

జి.వృష్ణవేణి మాట్లాడుతూ, సాల్టా, వెబీరియల్స్ సైన్స్, బయోకెమిస్ట్రీ వంటి అనేక రంగాల్లో కంప్యూటేషనల్ కెమిస్ట్రీ విస్తృతంగా ఉపయోగపడుతోందన్నారు. హిందూ స్టా సూల్స్ కమిటీ అడ్మినిస్ట్రేటివ్ అఫీసర్ డాక్టర్ వి.నారాయణరావు, వైస్ ట్రిస్నిపాల్స్ డాక్టర్ ఎం.వెంకటేశ్వరరావు, పి.ఎల్.రవేష్, విభాగాధిపతి ఓ.శైలజ, రీసెర్చ్ సెల్ డైరెక్టర్ డాక్టర్ కె.శిరీశ్ కుమార్ తదితరులు పాల్గొన్నారు.



High-Quality Research Possible Through Computational Chemistry: Dr. Mahesh Kumar



DECCAN FREEDOM NEWS
Vijayawada West

Computational chemistry enables high-quality research without the need for expensive chemical substances and lab equipment, said Dr. Mahesh Kumar Rava, Associate Professor in the Department of Chemistry at SRM University. He was addressing participants as the chief guest at a Faculty Development Programme on 'Computational Chemistry' jointly organized by the Department of Chemistry and Research Cell of KBN College on Wednesday.

Dr. Mahesh Kumar explained that computational chemistry is a hybrid field combining chemistry and computer science, which allows scientists to understand chemical changes at the atomic level. He emphasized that molecular modeling

can greatly accelerate drug development by designing effective compounds in less time. Compared to time-consuming laboratory experiments, computer simulations provide faster and more precise outcomes. He further stated that it is even possible to predict the environmental impact of industrial chemicals beforehand using these models.

College Principal Dr. G. Krishnaveni noted that computational chemistry is now widely applied in fields like pharmacy, materials science, and biochemistry. The event also saw participation from Hindu High Schools Committee Administrative Officer Dr. V. Narayana Rao, Vice Principals Dr. M. Venkateswara Rao and P.L. Ramesh, Head of the Department O. Shailaja, and Research Cell Director Dr. K. Kiran Kumar, among others.