



[ФОМРО1] МОДЕЛЮВАННЯ ХІМІКО-ТЕХНОЛОГІЧНИХ ПРОЦЕСІВ І КОМП'ЮТЕРНА ХІМІЯ



Робоча програма навчальної дисципліни (Силабус)

Реквізити навчальної дисципліни

Рівень вищої освіти	Другий (магістерський)
Галузь знань	-
Спеціальність	
Освітня програма	161Мп ТСФХ - Хімічні технології синтезу та фізико-хімічні властивості органічних матеріалів (ЄДЕБО id: 53268)161Мп ТСФХ+ - Хімічні технології синтезу та фізико-хімічні властивості органічних матеріалів (ЄДЕБО id: 58770)G1Мп ХТСФХВОМ - Хімічні технології синтезу та фізико-хімічні властивості органічних матеріалів (ЄДЕБО id: 82975)
Статус дисципліни	Нормативна
Форма здобуття вищої освіти	Очна
Рік підготовки, семестр	1 курс, осінній семестр
Обсяг дисципліни	4 кред. ()
Семестровий контроль/контрольні заходи	0
Розклад занять	https://rozklad.kpi.ua
Мова викладання	Українська / Англійська
Інформація про керівника курсу / викладачів	
Розміщення курсу	

Програма навчальної дисципліни

1. Опис навчальної дисципліни, її мета, предмет вивчання та результати навчання

...

1.1. Мета навчальної дисципліни.

Метою навчальної дисципліни є формування у студентів здатностей:

- – Здатність до пошуку, оброблення та аналізу інформації з різних джерел (К 3);
- – Здатність вести професійну, у тому числі науково-дослідну діяльність у міжнародному середовищі (К 6)
- – Здатність використовувати сучасне спеціальне наукове обладнання та програмне забезпечення при проведенні експериментальних досліджень і здійсненні дослідно-конструкторських розробок у сфері хімічних технологій та інженерії (К 11)
- – Здатність використовувати сучасні програми квантово-хімічних обчислень для

оптимізації хіміко-технологічних процесів, для обробки та інтерпретації результатів

хімічних експериментів тому числі з органічного синтезу (К12);

- – Здатність ідентифікувати, аналізувати і з науково-обґрунтованою аргументацією

планувати стратегію вирішення хіміко-технологічних проблем і задач виробництва

органічних матеріалів, косметичних продуктів, харчових добавок (К15);

- – Здатність використовувати сучасні методи досліджень, планувати і проводити

наукові експерименти та вирішувати актуальні технічні задачі в галузі органічного синтезу (К16).

2. Пререквізити та постреквізити дисципліни (місце в структурно-логічній схемі навчання за відповідною освітньою програмою)

Міждисциплінарні зв'язки: Матеріал кредитного модуля базується на дисциплінах «Органічна хімія», «Механізми органічних реакцій», «Хімія елементарноорганічних сполук», «Стереохімія органічних сполук», «Кінетика та термодинаміка органічних реакцій», «Хімія гетероциклічних сполук» і є завершальним у циклі професійної і практичної підготовки.

3. Зміст навчальної дисципліни

Тема 1. Вступ. Енергетика індивідуальних молекул. Ротаційна, коливальна, електронна енергії, відносні значення, спектральні області.

Тема 2. Ротаційна енергія молекул. Наближення жорсткого ротатора, квантування, правила відбору, нежорсткий ротатор,

Тема 3. Коливальна енергія молекул. Коливальний рух у наближенні гармонійного осцилятора. Вирішення хвильового рівняння для коливального руху. Правила добору. Потенційні функції. Нульова коливальна енергія. Коливальний рух у наближенні ангармонічного осцилятора. Функція Морзе. Ангармонічність. Переходи між коливальними рівнями, правила відбору, типи переходів.

Тема 4. Електронна енергія молекул. Рівень електронної енергії молекул. Принцип Франка Кондону. Типи переходів та спектри їм відповідні. Діаграма Яблонського, контроль переходів по спину.

Тема 5. Поверхні потенційної енергії – побудова. Коливання складних молекул. Правило 3N-6. Поверхні потенційної енергії. Незалежні координати. Критичні точки на ППЕ.

Тема 6. Зв'язок топології ППЕ із експериментальними даними. Ентропія та ентальпія активації. Розрахунки термодинамічних параметрів індивідуальних сполук важливих при розробці технології.

Тема 7. Аномалії на ППЕ: тунелювання та порушення адіабатичності. Розраїунки термодінамічні параметрів індивідуальних сполук. Розраїунки канстант швидкості та кінетичні параметрів реакції при виборі технологічного обладнання.

Тема 8. Перехідні стани та їх аналіз. Методи виявлення перехідних станів. Контроль за симетрією. Аналіз сідлових точок на ППЕ. Емпіричні підходи. Принцип найменшого руху. Постулат Хеммонда, принцип Кертіна-Гаммета.

Тема 9. Розрахунки ентропії. Обчислення ентропії у межах статистичної термодинаміки. Складові ентропії. Ентропія поступального, коливального та обертального рухів.

Тема 10. Методи розраїунків поверхонь потенційної енергії. Методи комп'ютерної хімії. Квантово-хімічні методи. Наближення, що використовуються у комп'ютерній хімії.

Тема 11. Рівняння Шредінгера. Класифікація базисів, валентно-розщеплені базиси, дифузні та поляризаційні функції. ($\hat{H}\Psi = E\Psi$). Пробна (неправильна) хвильова функція. Варіаційний принцип.

Тема 12. Молекулярно-механічний метод. Стерична енергія Ester. Види силових полів. Параметризація. Застосування методу ММ в органічній хімії. Теплоти освіти, енергія напруги Estr, гомодейсмічні рівняння.

Тема 13. Метод Хюккеля. Подання хвильової функції Ψ в ab initio. Продукт Хартрі. Спінкові оператори α та β . Спін-орбіталі. Базисні функції (χ), примітивні гауссіани (g). Молекулярні орбіталі (ϕ), наближення МО-ЛКАО. Обчислення електронної енергії молекул у методі Хартрі-Фока.

Тема 14. Неємпіричні методи. Наближення Борна-Опенгеймера. Рівняння Рутаана-Хала. Матриця Фока ($F_{\mu\nu}$), матриця перекривання ($S_{\mu\nu}$), матриця електронної густини ($P_{\lambda\sigma}$). 2-х електронні чотирицентрові інтеграли $\langle\mu\nu|\lambda\sigma\rangle$ та $\langle\mu\lambda|\sigma\nu\rangle$. Складності обчислення електронної енергії у методі Хартрі-Фока. Ітераційний метод самоузгодженого поля (ССП). Полегшення підходу ab initio. Спрощене обчислення електронної енергії молекул у методі Хартрі-Фока, напівемпіричні методи (CNDO та MNDO).

Тема 15. Урахування електронної кореляції. Метод конфігураційної взаємодії. Метод Меллера-Плесета (MPn). Метод пов'язаних кластерів (CC). Методи функціоналу електронної густини. Рівняння Кона-Шама. Подання електронної енергії через функціонали електронної густини, види термів. Обмінно-кореляційний терм E_{XC} та його складові. Види обмінних та кореляційних функціоналів. Практичні аспекти використання методів функціоналу електронної густини при обрахунках параметрів технологічних процесів.

Тема 16. Порівняння продуктивності та витрат при розрахунках у різних наближеннях. Сучасні програми комп'ютерної хімії, програмний пакети Gaussian і GAMESS. Лінки. Оптимізація геометрії молекули. Критерії збіжності. Підведення ітогів. Practical aspects of using electron density functional methods in calculating process parameters.

Topic 16. Comparison of productivity and costs in calculations in different approximations. Modern programs of computational chemistry, software packages Gaussian and GAMESS. Links. Optimization of molecular geometry. Convergence criteria. Summing up.

Topic 1. Introduction. Energetics of individual molecules. Rotational, vibrational, electronic energies, relative values, spectral regions.

Topic 2. Rotational energy of molecules. Rigid rotator approximation, quantization, selection rules, non-rigid rotator

Topic 3. Vibrational energy of molecules. Vibrational motion in the approximation of a harmonic oscillator. Solution of the wave equation for vibrational motion. Selection rules. Potential functions.

Zero vibrational energy. Vibrational motion in the approximation of anharmonic oscillator. Morse function. Anharmonicity. Transitions between vibrational levels, selection rules, types of transitions.

Topic 4. Electronic energy of molecules. Electronic energy level of molecules. Frank-Condon principle. Types of transitions and their corresponding spectra. Yablonski diagram, control of transitions by spin. Topic 5. Potential energy surfaces - construction. Vibrations of complex molecules. Rule 3N-6. Potential energy surfaces. Independent coordinates. Critical points on the PES.

Topic 5. Potential energy surfaces - construction. Vibrations of complex molecules. Rule 3N-6. Potential energy surfaces. Independent coordinates. Critical points on PES.

Topic 6. Relationship of PPE topology with experimental data. Entropy and enthalpy of activation. Calculations of thermodynamic parameters of individual compounds important in the development of technology.

Topic 7. Anomalies on PPE: tunneling and adiabaticity violations. Calculations of thermodynamic parameters of individual compounds. Calculations of rate constants and kinetic parameters of the reaction when choosing technological equipment.

Topic 8. Transition states and their analysis. Methods for detecting transition states. Symmetry control. Analysis of saddle points on PPE. Empirical approaches. Principle of least motion. Hammond's postulate, Curtin-Hammett principle.

Topic 9. Entropy calculations. Entropy calculations within statistical thermodynamics. Entropy components. Entropy of translational, oscillatory and rotational motions.

Topic 10. Methods of calculating potential energy surfaces. Methods of computational chemistry. Quantum chemical methods. Approximations used in computational chemistry.

Topic 11. Schrödinger equation. Classification of bases, valence-split bases, diffuse and polarization functions. ($\hat{H}\Psi = E \times \Psi$). Trial (irregular) wave function. Variational principle.

Topic 12. Molecular mechanical method. Steric energy Ester. Types of force fields. Parameterization. Application of the MM method in organic chemistry. Heats of formation, strain energy Estr, homodeismic equations.

Topic 13. Hückel's method. Representation of the wave function Ψ in ab initio. Hartree product. Spin operators α and β . Spin orbitals. Basis functions (χ), primitive Gaussians (g). Molecular orbitals (ϕ), MO-LCAO approximation. Calculation of the electronic energy of molecules in the Hartree-Fock method.

Topic 14. Non-empirical methods. Born-Oppenheimer approximation. Rutan-Hall equation. Fock matrix ($F_{\mu\nu}$), overlap matrix ($S_{\mu\nu}$), electron density matrix ($P_{\lambda\sigma}$). 2-electron four-center integrals $\langle \mu\nu | \lambda\sigma \rangle$ and $\langle \mu\lambda | \sigma\nu \rangle$. Complexities of calculating electron energy in the Hartree-Fock method. Iterative method of self-consistent field (SCF). Facilitation of the ab initio approach. Simplified calculation of the electronic energy of molecules in the Hartree-Fock method, semi-empirical methods (CNDO and MNDO).

Topic 15. Taking into account electronic correlation. Configuration interaction method. Möller-Plesset method (MPn). Connected cluster method (CC). Electron density functional methods. Kohn-Sham equation. Representation of electronic energy through electron density functionals, types of terms. Exchange-correlation term of the ECS and its components. Types of exchange and correlation functionals. Practical aspects of using electron density functional methods in calculating process parameters.

Topic 16. Comparison of productivity and costs in calculations in different approximations. Modern programs of computational chemistry, software packages Gaussian and GAMESS. Links. Optimization of molecular geometry. Convergence criteria. Summing up.

4. Навчальні матеріали та ресурси

Навчальні матеріали, зазначені нижче, доступні у бібліотеці університету та у бібліотеці кафедри органічної хімії та технології органічних речовин. Обов'язковою до вивчення є базова література, інші матеріали – факультативні. Розділи та теми, з якими студент має ознайомитись самостійно, викладач зазначає на лекційних та практичних заняттях.

Базова: В бібліотеці університету та у бібліотеці кафедри органічної хімії та технології органічних речовин.

1. Чирва В.Я., Ярмолюк С.М., Толкачова Н.В., Земляков О.Є. Органічна хімія: підручник. – Львів: БаК, 2009. – 996 с.
2. Домбровський А.В., Найдан В.М. Органічна хімія. К.: Вища школа, 1992, - 504 с.

Додаткова:

Надаються розділи класичних монографій, сучасні спеціалізовані монографії, огляди з реєр-review журналів (*Chem. Rev.*, *Acc. Chem. Res.*, *Chem. Soc. Rev.* та ін.), оригінальні статті з реєр-review журналів а також:

1. Д. Salem. *Electron in Chemical Reactions*. М., Мир, 1985.
2. G. Maskill. *Physical Bases of Organic Chemistry*, Pergamon Press, 1990.
3. C. J. Cramer *Essentials of Computational Chemistry*, John Wiley & Sons (2002)
4. T. Clark *A Handbook of Computational Chemistry*, Wiley, New York (1985).
5. R. Dronskowski *Computational Chemistry of Solid State Materials*, Wiley-VCH (2005).

A.K. Hartmann, [Practical Guide to Computer Simulations](#), [World Scientific](#) (2009)

Навчальний контент

5. Методика опанування навчальної дисципліни (освітнього компонента)

Вичитування лекцій з дисципліни проводиться паралельно з виконанням студентами індивідуальних завдань та розглядом ними питань, що виносяться на самостійну роботу. При читанні лекцій при змішаному навчанні застосовуються засоби для відеоконференцій (Google Meet, Zoom тощо) та ілюстративний матеріал у вигляді презентацій якій передається слухачам через чат. Після кожної лекції рекомендується ознайомитись з матеріалами, рекомендованими для самостійного вивчення, а перед наступною лекцією – повторити матеріал попередньої. Кожен студент отримує індивідуальне завдання у вигляді аналізу оригінальних статей по темі лекції.

Лекція 1. Вступ. Сучасні концепції в хімії -1

Лекція 2. Вступ. Сучасні концепції в хімії -2

Лекція 3. Енергетика індивідуальних молекул.

Лекція 4. Ротаційна енергія молекул.

Лекція 5. Коливальна енергія молекул 1.

Лекція 6. Коливальна енергія молекул 2.

Лекція 7. Електронна енергія молекул.

Лекція 8. Поверхні потенційної енергії – побудова

Лекція 9. Поверхні потенційної енергії – аналіз 1.

Лекція 10. Поверхні потенційної енергії – аналіз 2.

Лекція 11. Перехідні стани та їх аналіз 1.

Лекція 12. Перехідні стани та їх аналіз 2.

Лекція 13. Аномалії на поверхні потенційної енергії.

Лекція 14. Розрахунки ентропії.

Лекція 15. Методи розрахунків поверхонь потенційної енергії 1

Лекція 16. Методи розрахунків поверхонь потенційної енергії 2

Лекція 17. Рівняння Шредінгера, загальні аспекти.

Лекція 18. Рівняння Шредінгера, наближення.

Лекція 19. Молекулярно-механічний метод.

Лекція 20. Електронна кореляція. Методи врахування ab initio.

Лекція 21. DFT методи.

Лекція 22. Підведення ітогів.

Lecture 1. Introduction. Modern concepts in chemistry -1 Lecture 2. Introduction. Modern concepts in chemistry -2 Lecture 3. Energetics of individual molecules. Lecture 4. Rotational energy of molecules. Lecture 5. Vibrational energy of molecules 1. Lecture 6. Vibrational energy of molecules 2. Lecture 7. Electronic energy of molecules. Lecture 8. Potential energy surfaces - construction Lecture 9. Potential energy surfaces - analysis 1. Lecture 10. Potential energy surfaces - analysis 2. Lecture 11. Transition states and their analysis 1. Lecture 12. Transition states and their analysis 2. Lecture 13. Anomalies on the potential energy surface. Lecture 14. Entropy calculations. Lecture 15. Methods of calculating potential energy surfaces 1 Lecture 16. Methods of calculating potential energy surfaces 2 Lecture 17. Schrödinger equation, general aspects. Lecture 18. Schrödinger equation, approximation. Lecture 19. Molecular mechanical method. Lecture 20. Electronic correlation. Methods of ab initio consideration. Lecture 21. DFT methods. Lecture 22. Summing up.

6. Самостійна робота студента

Самостійна робота студента (СРС) протягом семестру включає повторення лекційного матеріалу, освоєння теоретичного матеріалу винесеного на самостійне самоопрацювання, виконання індивідуальних завдань, підготовка до написання модульної контрольної роботи, підготовка до екзамену. Рекомендована кількість годин, яка відводиться на підготовку до зазначених видів робіт:

Вид СРС, Кількість годин на підготовку

Підготовка до аудиторних занять: повторення лекційного матеріалу, складання попередніх варіантів програм для проведення розрахунків на заняттях, оформлення звітів 1 – 2 години на тиждень

Виконання індивідуальних завдань 60 годин

Підготовка до МКР (повторення матеріалу) 6 годин

Підготовка до екзамену 30 годин

Політика та контроль

7. Політика навчальної дисципліни (освітнього компонента)

Всі вимоги не суперечать законодавству України і відповідають нормативним документам Університету. У звичайному режимі роботи університету лекції та лабораторні заняття проводяться в навчальних аудиторіях. У змішаному режимі лекційні заняття проводяться через платформу дистанційного навчання. На початку кожної лекції лектор може проводити опитування за матеріалами попередньої лекції із застосуванням інтерактивних засобів (Google Forms). Перед початком чергової теми лектор може надсилати питання із застосуванням інтерактивних засобів з метою визначення рівня обізнаності здобувачів за даною темою, підвищення зацікавленості та залучення слухачів до розв'язання прикладів.

Після перевірки завдання викладачем на захист виставляється загальна оцінка і робота вважається захищеною.

Несвоєчасні захист і виконання роботи без поважної причини штрафуються відповідно до правил призначення заохочувальних та штрафних балів.

Правила призначення заохочувальних та штрафних балів:

Несвоєчасне виконання практичного завдання без поважної причини штрафується 1 балом;

Політика дедлайнів та перескладань: визначається п. 8 Положення про поточний, календарний та семестровий контроль результатів навчання в КПІ ім. Ігоря Сікорського

Політика щодо академічної доброчесності: визначається політикою академічної чесності та іншими положеннями Кодексу честі університету.

8. Види контролю та рейтингова система оцінювання результатів навчання (PCO)

...

Таблиця відповідності рейтингових балів оцінкам за університетською шкалою

Кількість балів	Оцінка
100-95	Відмінно
94-85	Дуже добре
84-75	Добре
74-65	Задовільно
64-60	Достатньо
Менше 60	Незадовільно
Не виконані умови допуску	Не допущено

9. Додаткова інформація з дисципліни (освітнього компонента)

...

Опис матеріально-технічного та інформаційного забезпечення дисципліни

Робочу програму навчальної дисципліни (силабус):

Складено

Ухвалено кафедрою ОХТОР (протокол № _____ від _____)

Погоджено методичною комісією факультету/ІНІ (протокол № _____ від _____)