



# Моделювання хіміко-технологічних процесів і комп'ютерної хімії. Курсова робота

## Робоча програма навчальної дисципліни (Силабус)

### Реквізити навчальної дисципліни

Рівень вищої освіти *Другий (магістерський)*

Галузь знань	16 Хімічна та біоінженерія
Спеціальність	161 Хімічні технології та інженерія
Освітня програма	Хімічні-технології синтезу та фізико-хімічні властивості органічних матеріалів
Статус дисципліни	Нормативна, цикл професійної підготовки
Форма навчання	Очна (денна)
Рік підготовки, семестр	1 курс, осінній семестр
Обсяг дисципліни	1 кредит, Самостійна робота 30 год.
Семестровий контроль/ контрольні заходи	Курсова робота, залік
Розклад занять	<a href="http://rozklad.kpi.ua">http://rozklad.kpi.ua</a>
Мова викладання	Українська/Англійська
Інформація про керівника курсу / викладачів	СРС: ас. О.В. Гайдай
Розміщення курсу	<a href="https://classroom.google.com/u/0/c/NjMzNzgwNzA5NjU1">https://classroom.google.com/u/0/c/NjMzNzgwNzA5NjU1</a>

### Програма навчальної дисципліни

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

##### 1.1. Мета навчальної дисципліни.

Метою навчальної дисципліни є формування у студентів здатностей:

- Здатність організувати і управляти хіміко-технологічними процесами в умовах промислового виробництва та в науково-дослідних лабораторіях з урахуванням соціальних, економічних та екологічних аспектів (K9).
- Здатність використовувати сучасні програми квантово-хімічних обчислень для оптимізації хіміко-технологічних процесів, для обробки та інтерпретації результатів хімічних експериментів тому числі з органічного синтезу (K12);

## 1.2 Основні завдання навчальної дисципліни.

Згідно з вимогами освітньо-професійної програми навчальної дисципліни студенти після засвоєння навчальної дисципліни мають продемонструвати такі результати навчання:

- Критично осмислювати наукові концепції та сучасні теорії хімічних процесів та хімічної інженерії, застосовувати їх при проведенні наукових досліджень та створенні інновацій (ПР1);
- Розробляти та реалізовувати проекти в сфері хімічних технологій та дотичні до неї міждисциплінарні проекти з урахуванням соціальних, економічних, екологічних та правових аспектів (ПР6);
- Знання сучасних методів дослідження, приладів та обладнання, сучасного програмного забезпечення в галузі технологій та вивчення фізико-хімічних властивостей органічних матеріалів (ПР8);
- Знання методів визначення кінетичних рівнянь на основі експериментальних даних для планування технологічних процесів, практичне застосування законів хімічної термодинаміки та законів хімічної кінетики для виробництва органічних матеріалів (ПР10).

## 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», «Фізична хімія», «Механізми органічних реакцій», «Кінетика та термодинаміка органічних реакцій» і є завершальним у циклі професійної і практичної підготовки.

## 3. Зміст навчальної дисципліни

### Графік виконання курсової роботи

Тиждень семестру	Назва етапу роботи	Навчальний час на СРС (підготовку)
5	Отримання теми та завдання	
6-9	Виконання першої частини курсової роботи	6
9-14	Виконання другої частини курсової роботи	14
15	Формулювання висновків, оформлення курсової роботи	6
16-17	Подання курсової роботи на перевірку	
18	Захист курсової роботи	4

#### 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. Квантова механіка : підручник / І. О. Вакарчук. — 4-те вид., доп. —. Львів : ЛНУ імені Івана Франка, 2012. — 872с.

#### Додаткова:

1. G. Maskill. *Physical Bases of Organic Chemistry*, Pergamon Press, 1990.
2. C. J. Cramer *Essentials of Computational Chemistry*, John Wiley & Sons (2002)
3. T. Clark *A Handbook of Computational Chemistry*, Wiley, New York (1985).
4. A.K. Hartmann, *Practical Guide to Computer Simulations*, World Scientific (2009)
5. F. Jensen *Introduction to Computational Chemistry*, John Wiley & Sons (1999).

#### Інформаційні ресурси:

1. <http://orgchem.xtf.kpi.ua/compchem/>
2. [http://orgchem.xtf.kpi.ua/files/Gaussian\\_09\\_ReferenceManual.pdf](http://orgchem.xtf.kpi.ua/files/Gaussian_09_ReferenceManual.pdf)

### Навчальний контент

#### 5. Методика опанування навчальної дисципліни (освітнього компонента)

Курсова робота складається з двох частин:

*перша частина* – Побудова геометрії молекули з урахуванням симетрії у внутрішній системі координат (Z-matrix).

*друга частина* – Розрахунок термодинамічних параметрів реакції та знаходження геометрії та енергії заданого перехідного стану.

Тема та завдання для курсової роботи видається викладачем на практичному занятті. В рамках визначеної теми курсової роботи, необхідно виконати наступні задачі:

##### Частина 1

- 1.1 Визначити елементів симетрії молекули, виходячи з заданої точкової групи симетрії;

1.2 Побудувати тривимірну модель молекули у системі внутрішніх координат, спираючись на визначені елементи симетрії та використовуючи заданий стандартний формат запису;

## Частина 2

2.1 Виходячи з заданої геометрії перехідного стану з врахуванням його симетрії, запропонувати схему реакції (процесу), визначити мінімуми;

2.2 Побудувати геометрію перехідного стану з заданою симетрією у внутрішніх координатах (використовуючи досвід здобутий при виконанні першої частини КР)

2.3 Оптимізувати геометрію з п 2.2, як перехідний стан у програмі для квантово-хімічних розрахунків (Gaussian09);

2.4 Проаналізувати результати розрахунку п.2.3, в тому числі оптимізовану геометрію, кількість та характер уявних коливальних мод;

2.5 Враховуючи п. 2.1 та аналіз коливальних мод п 2.4 побудувати геометрії мінімумів (мінімуму)

2.6 Оптимізувати геометрії з п 2.5, як мінімуми у програмі для квантово-хімічних розрахунків (Gaussian09);

2.7 Визначити енергетичні параметри перехідного стану, та мінімумів. Побудувати енергетичну діаграму. Сформулювати висновки.

2.8 Оформити пояснювальну записку до курсової роботи

Основну інформацію та знання необхідні для вирішення вищевказаних задач, студенти отримують на практичних заняттях з курсу «Моделювання хіміко-технологічних процесів і комп'ютерної хімії»

### **Самостійна робота студента**

Самостійна робота окремою складовою навчальним планом не передбачення і є частиною виконання курсової роботи.

## **Політика та контроль**

### **6. Політика навчальної дисципліни (освітнього компонента)**

Порядок виконання та захисту курсової роботи

Студент виконує курсову роботу самостійно.

Демонстрація поточних результатів, обговорення питань по роботі та ін. відбувається в час консультації викладача або при наявності вільного часу за розкладом практичних занять.

Для захисту студент попередньо надає оформлену пояснювальну записку у електронному вигляді (.pdf або .doc – файл), а також додає актуальні вхідні та вихідні файли використані при квантово-хімічних розрахунках або вказує їх розташування при розрахунку на віддаленому сервері. В процесі захисту перевіряється геометрії для

частини 1 та частини 2, а розглядаються коливальні моди перехідного стану та одержані енергетичні параметри.

При виконанні курсової роботи необхідно дотримуватись графіку наведеному в п.3 цього силабусу. За подання ПЗ на розгляд після встановленого терміну без поважних причин, або невиконання інших календарних вимог, максимальний бал за роботу знижується : -1 бали за кожен наступний тиждень після (але не більше - 5 балів).

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

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.

## **7. Види контролю та рейтингова система оцінювання результатів навчання (PCO)**

Види контролю встановлюються відповідно до Положення про поточний, календарний та семестровий контроль результатів навчання в КПІ ім. Ігоря Сікорського:

Рейтинг студента з дисципліни складається з балів:

- 1) стартова складова;
- 2) захист курсової роботи;

Система рейтингових (вагових) балів та критерії оцінювання

### 1. Стартова складова

Ваговий бал - 70. Складові стартової складової:

#### 1.1 Дотримання вимог календарного плану - 5 балів

При невиконанні календарних вимог, максимальний бал за роботу знижується : -1 бали за кожен наступний тиждень після

#### 1.2 Перша частина роботи – 20 балів

19-20 балів: Внутрішні координати молекули задані правильно, відхилення від заданої симетрії відсутні. Можливі незначні відхилення від стандартного заданого формату представлення внутрішніх координат або незначні відхилення стандартних довжин зв'язків та валентних кутів;

15-18 балів: Внутрішні координати молекули задані правильно, відхилення від заданої симетрії мінімальні (присутня більшість елементів симетрії). Відхилення від стандартного заданого формату представлення внутрішніх координат та/або відхилення стандартних довжин зв'язків та валентних кутів за умови відсутності відхилень у симетрії;

7-14 балів: Геометрія схожа на задану, але є суттєві відхилення від заданої симетрії (присутні мінімум елементів симетрії);

0-6 балів: Геометрія суттєво відрізняється, відсутні елементи симетрії. Завдання не виконано чи виконано некоректно.

#### 1.3 Друга частина роботи – 40 балів

38-40 балів: Правильно знайдено геометрії мінімумів та перехідного стану, симетрія відповідає заданій, коливання уявної моди для перехідного стану відповідає заданому процесу. Можливі незначні помилки у визначенні енергетичних характеристик процесу та побудові енергетичної діаграми;

30-37 балів: Правильно знайдені геометрії мінімумів та перехідного стану, симетрія перехідного стану несуттєво відрізняється, уявна коливальна мода виглядає підозріло. Або суттєві помилки у визначенні енергетичних характеристик процесу;

20-29 балів: Неправильно знайдено геометрії мінімумів або неправильно знайдена геометрія перехідного стану, коливання не відповідають заданому процесу. Суттєві помилки у визначенні енергетичних характеристик процесу;

7-19 балів: Розрахунки проведено, однак не знайдено правильні чи схожі геометрії мінімумів та перехідного стану;

0-6 балів: Наявні певні фрагменти розрахунків.

1.4 Якість оформлення та повнота подання інформації - 5 балів

Всього: 70 балів

2. Захист роботи

Ваговий бал – 30.

Складові захисту:

Ступінь володіння теоретичним матеріалом – 10 балів

Якість відповідей на питання та вміння захищати свою думку – 20 балів

### **Штрафні та заохочувальні бали**

Штрафні бали знімаються:

- За несвоєчасну здачу завдання або невиконання інших календарних вимог (без поважної причини) знімається - 1 бал за кожен наступний тиждень після визначеної дати (але не більше 5 балів).

Заохочувальні бали додаються :

- За проведення літературного пошуку щодо заданого процесу, при вирішенні нетривіальних проблем, що можуть виникати при виконанні другої частини – максимум 5 балів.

Розрахунок шкали (R) рейтингу

Сума вагових балів контрольних заходів протягом семестру складається зі стартового рейтингу  $R_{Ст}$

оцінка за захист роботи  $R_3$  .

Загальний рейтинг студента:  $R_{КР} = R_{Ст} + R_3$

Максимальне значення стартової шкали  $R_{Ст} = 70$  балів.

Максимальне значення захисту  $R_3 = 30$  балів.

Всього  $R_{КР} = 70 + 30 = 100$  балів.

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

#### **8. Додаткова інформація з дисципліни (освітнього компонента)**

Приклад оформлення курсової роботи знаходиться на сайті кафедри ОХ та ТОР за посиланням [http://orgchem.xtf.kpi.ua/files/Comp\\_Chem\\_KR\\_Sample.pdf](http://orgchem.xtf.kpi.ua/files/Comp_Chem_KR_Sample.pdf).

**Складено** ас. каф. ОХ та ТОР, кандидат хімічних наук, Гайдай Олександр Васильович  
проф. каф. ОХ та ТОР, доктор хімічних наук, професор, Фокін Андрій Артурович

**Ухвалено** кафедрою ОХ та ТОР (протокол № 14 від 23.06.2024)

Погоджено Методичною комісією факультету (протокол № 10 від 21.06.2024)