



Моделювання хіміко-технологічних процесів і комп'ютерна хімія.

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	<i>Нормативна, професійна підготовка</i>
Форма навчання	<i>Очна (денна)</i>
Рік підготовки, семестр	<i>1 курс, осінній семестр</i>
Обсяг дисципліни	6 кредитів, 54 лекц, 18 пр, 108 СРС
Семестровий контроль/ контрольні заходи	<i>МКР, екзамен</i>
Розклад занять	Лек.36 год., пр. 18 год., СРС 108 год.
Мова викладання	<i>Українська/Англійська</i>
Інформація про керівника курсу / викладачів	Лектор: Проф. каф. ОХ та ТОР, доктор хімічних наук, професор, Фокін Андрій Артурович, aaf@xtf.kpi.ua Практичні / Семінарські: асс. О.В. Гайдай
Розміщення курсу	https://campus.kpi.ua/tutor/index.php?mode=mob&create&filter=&sd=10166&cm=2

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 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 виробництв 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).

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 (ПР 1);
- Здійснювати у науково-технічній літературі, патентах, базах даних, інших джерелах пошук необхідної інформації з хімічної технології, процесів і обладнання виробництв хімічних речовин та матеріалів на їх основі, систематизувати, і аналізувати та оцінювати відповідну інформацію (ПР 7);
- Знання сучасних методів дослідження, приладів та обладнань, програмного забезпечення в галузі технологій органічних продуктів (ПР 8);
- Вміти використовуючи наукові знання синтезу органічних речовин, в умовах лабораторії або виробництва, для визначення даних до технічного завдання сформулювати мету виконання дослідження (створення нового об'єкту, напрямом вдосконалення існуючого, визначення або прогнозування ключових параметрів і властивостей системи та ін (ПР12).

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 елементарних 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 термодинамічних параметрів індивідуальних сполук. Розраїунки канстант швидкості та кінетичний параметр 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 обертового 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. ($\hat{H}\Psi = E \times \Psi$). 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, гомодейсні рівняння.

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

Тема 14. Неемпіричні методи. Наближення Борна-Опенгеймера. Рівняння Рутаана-Хала. Матриця Фока ($F_{\mu\nu}$), матриця перекивання ($S_{\mu\nu}$), 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 ϵ_{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 пакет Gaussian. Лінки. Оптимізація геометрії молекули. Критерії збіжності. Підведення ітогів.

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 peer-review журналів (*Chem. Rev.*, *Acc. Chem. Res.*, *Chem. Soc. Rev.* та ін.), оригінальні статті з peer-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).
6. A.K. Hartmann, *Practical Guide to Computer Simulations*, World Scientific (2009)

Навчальний контент

5. Методика опанування навчальної дисципліни (освітнього компонента)

Лекційні заняття

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. Енергетика індивідуальних молекул.

Лекція 2. Ротаційна енергія молекул.

Лекція 3. Коливальна енергія молекул 1.

Лекція 4. Коливальна енергія молекул 2.

Лекція 5. Електронна енергія молекул.

Лекція 6. Поверхні потенційної енергії – побудова

Лекція 7. Поверхні потенційної енергії – аналіз 1.

Лекція 8. Поверхні потенційної енергії – аналіз 2.

Лекція 9. Перехідні стани та їх аналіз.

Лекція 10. Аномалії на поверхні потенційної енергії.

Лекція 11. Розрахунки ентропії.

Лекція 12. Методи розраїунків поверхонь потенційної енергії.

Лекція 13. Рівняння Шредінгера.

Лекція 14. Молекулярно-механічний метод

Лекція 15. Підхід Хюккеля.

Лекція 16. Неемпіричні методи.

Лекція 17. Облік електронної кореляції.

Лекція 18. Методи функціоналу електронної густини.

Практичні заняття

Практичні роботи мають на меті навчити студентів самостійно оцінювати роль реакційних інтермедіатів в конкретній хімічних перетвореннях через вирішення задач.

Практичні заняття 1-3. Побудова Z-матриць.

Практичні заняття 4-8. Розбір індивідуальних завдань – мінімуми.

Практичні заняття 9-15. Розбір індивідуальних завдань – перехідні стани.

Практичні заняття 9-17. Аналіз ППЕ реакцій.

Практичне заняття 18. Підведення ітогів, прийом курсової роботи.

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

6. 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.

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:

1. Поточний контроль: опитування на практичних заняттях, МКР.
2. Календарний контроль: проводиться двічі на семестр як моніторинг поточного стану виконання вимог силабусу.
3. Семестровий контроль: письмовий екзамен.

Рейтингова система оцінювання результатів навчання

1. Рейтинг студента з кредитного модуля розраховується виходячи із 100-бальної шкали, з них 50 балів складає стартова шкала. Стартовий рейтинг (протягом семестру) складається з балів, що студент отримує за:

- Виконання індивідуальних завдань (7 тем занять);
- написання модульної контрольної роботи (МКР);

2. Критерії нарахування балів:

- 2.1. Практична робота:

- Максимальна кількість балів на усіх роботах дорівнює 10 балів.

- Критерії оцінювання:

9-10 балів: «відмінно» – повна відповідь (не менше 90% потрібної інформації);

6-8 балів: «дуже добре» – достатньо повна відповідь (не менше 75% потрібної інформації, або незначні неточності);

4-5 балів: «добре» – неповна відповідь (не менше 60% потрібної інформації та деякі помилки);

2-3 балів: «задовільно» – неповна відповідь (не менше 35% потрібної інформації та деякі помилки);

0-1 балів: «незадовільно» – незадовільна відповідь

2.2. Модульна контрольна робота

- Кількість завдань цього виду – 1.

- Модульна контрольна робота оцінюється в 25 балів.

- Критерії оцінювання модульної контрольної роботи:

21-25 балів: «відмінно» – повна відповідь (не менше 90% потрібної інформації);

15-20 балів: «дуже добре» – достатньо повна відповідь (не менше 75% потрібної інформації, або незначні неточності);

10-14 балів: «добре» – неповна відповідь (не менше 60% потрібної інформації та деякі помилки);

5-9 балів: «задовільно» – неповна відповідь (не менше 35% потрібної інформації та деякі помилки);

0-5 балів: «незадовільно» – незадовільна відповідь

2.2. Курсова робота

Метою курсової роботи є практичне засвоєння і закріплення теоретичних знань, отриманих на лекціях та в процесі самостійної роботи з літературними джерелами в ході вивчення навчальної дисципліни. Матеріал індивідуальних завдань включає тренувальне питання по складанню Z-матриці молекули в заданій симетрії, а також імічного перетворення для якого слід проаналізувати ключовий фрагмент повкрхні потенційної енергії.

Оцінюється в 25 балів.

21-25 балів: «відмінно» – повна відповідь (не менше 90% потрібної інформації);

15-20 балів: «дуже добре» – достатньо повна відповідь (не менше 75% потрібної інформації, або незначні неточності);

10-14 балів: «добре» – неповна відповідь (не менше 60% потрібної інформації та деякі помилки);

5-9 балів: «задовільно» – неповна відповідь (не менше 35% потрібної інформації та деякі помилки);

0-5 балів: «незадовільно» – незадовільна відповідь

Штрафні та заохочувальні бали

- За несвоєчасну здачу завдання (без поважної причини) знімається - 2 бали (тобто, при несвоєчасному написанні максимальна оцінка -3 бали).
- Заохочувальні бали додаються :
- За активну роботу на лекції нараховується до 1 заохочувального балу (але не більше 5 балів на семестр).
- за якість виконання індивідуальних завдань - 3 бали.
- Студенти, що набрали суму балів за семестр 30 і більше (0.6 рейтингу за роботу протягом семестру) можуть складати екзамен. Якщо семестровий рейтинг менше 30 балів потрібно додаткове опрацювання матеріалу з метою підвищення рейтингу (виконання необхідної кількості індивідуальних завдань).
- Студенти отримують позитивні атестації у семестрі , якщо поточна сума набраних балів відповідає 0,5 і більше від максимально можливої кількості балів на момент проведення атестації.

2.3. Екзамен

На екзамені студенти виконують письмову роботу. Кожне завдання містить одне теоретичне запитання (завдання) і одно практичне. Перелік питань наведений у методичних рекомендаціях до засвоєння кредитного модуля. Кожне питання оцінюється у 15 балів.

Система оцінювання теоретичного питання:

13.5-15 балів: «відмінно» – повна відповідь (не менше 90% потрібної інформації);

10-13 балів: «дуже добре» – достатньо повна відповідь (не менше 75% потрібної інформації, або незначні неточності);

7-9.5 балів: «добре» – неповна відповідь (не менше 60% потрібної інформації та деякі помилки);

5-6 балів: «задовільно» – неповна відповідь (не менше 35% потрібної інформації та деякі помилки);

0-5 балів: «незадовільно» – незадовільна відповідь

Максимальна сума балів, яку студент може набрати протягом семестру, складає 60 балів:

$$RC = r_{\text{пр}} + r_{\text{мкр}} + r_{\text{із}} + r_{\text{ех}} = 10 + 25 + 25 + 40 = 100 \text{ балів}$$

Умовою допуску до екзамену є зарахування всіх комп'ютерних практикумів, написання МКР та кількість рейтингових балів не менше 30.

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)

- Вимоги до оформлення домашньої контрольної роботи, перелік запитань до МКР та екзамену наведені у Google Classroom «Органічна хімія чистих виробництв» (платформа Sikorsky-distance).
- Перелік матеріалів, якими дозволено користуватись під час екзамену: Немає

9. Додаткова інформація з дисципліни (освітнього компонента)

Перелік питань до МКР та екзамену наведені у Електронному кампусі. У випадку проходження дистанційних чи онлайн курсів за темою освітньої компоненти зараховуються сертифікати, отримані у неформальній освіті. Відповідність сертифікату програмі ОК визначає лектор. Загальна кількість перезарахованих годин не має перевищувати 25%.

Складено проф. каф. ОХ та ТОР, доктор хімічних наук, професор, Фокін Андрій Артурович

Ухвалено кафедрою органічної хімії та технології органічних виробництв (протокол № 14 від 23.06.2024)

Погоджено Методичною комісією факультету (протокол № 10 від 21.06.2024 р.)