

**ФІЗИКО-МЕХАНІЧНИЙ ІНСТИТУТ ІМ. Г.В. КАРПЕНКА
НАН УКРАЇНИ**

ЗАТВЕРДЖУЮ

Директор Фізико-механічного
інституту ім. Г.В. Карпенка НАН
України



З.Т. Назарчук
2020 р.

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ
КВАНТОВО-ХІМІЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ
ПРОЦЕСІВ, ЩО ПРОТІКАЮТЬ НА МЕЖІ
РОЗДІЛУ ФАЗ

галузь знань: 16 Хімічна та біоінженерія

спеціальність: 161 Хімічні технології та інженерія

кваліфікація: доктор філософії

Львів
2020

Робоча програма розроблена з дисципліни «Квантово-хімічне моделювання процесів, що протікають на межі розділу фаз» для аспірантів за спеціальністю 161 Хімічні технології та інженерія.

Розробник: завідувач відділу корозії та протикорозійного захисту ФМІ ім. Г.В. Карпенка НАН України доктор технічних наук; старший науковий співробітник; зі спеціальності 161 – хімічні технології та інженерія (05.17.14 – хімічний опір матеріалів та захист від корозії) Корній С.А.

1. СКЛАД І СТРУКТУРА ДИСЦИПЛІНИ

Курс та семестр за робочим навчальним планом		1/2	–	–	Всього
Кількість кредитів ECTS		2,0	–	–	2,0
Кількість семестрових залікових модулів		4	–	–	4
Повний обсяг часу, год.		60	–	–	60
В тому числі кількість аудиторних занять, год.		40	–	–	40
З них, год.	лекційних	32	–	–	32
	лабораторних	–	–	–	–
	Практичних (семінарських)	8	–	–	8
Самостійна робота (СР), год.		20	–	–	20
Підсумкова форма контролю I – екзамен 3 – залік		I	–	–	I

1.1. РОЗПОДІЛ ЗА СЕМЕСТРАМИ ТА МОДУЛЯМИ

№	Найменування змістових модулів	Кількість годин (ауд./СР)		
		Лекції	Лабораторні заняття	Практичні заняття
1	2	3	4	5
1	Передумови та можливості використання теоретичних підходів на атомно-молекулярному рівні для моделювання та розрахунку корозійних процесів	8/4	-	
2	Основні положення та методи квантової хімії	8/4	-	
3	Методичні підходи до проведення квантово-хімічного розрахунку систем метал-середовище. Моделі поверхні металу	8/4		4/2
4	Практичні застосування методів квантової хімії для моделювання корозійних систем та інгібіторів корозії. Сучасне програмне забезпечення квантово-хімічних розрахунків	8/4		4/2
Всього:		32/16	-	8/4

2. МЕТА ТА ЗАВДАННЯ НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

2.1. Мета навчальної дисципліни – дати аспірантам уявлення про сучасні методи квантової хімії, а також їх можливості для розрахунку та моделювання елементарних стадій процесів, що протікають на межі розділу метал-середовище.

2.2. Завдання навчальної дисципліни:

- ознайомити аспірантів з атомно-молекулярними процесами, які проходять на поверхні металів під час його взаємодії із середовищем;
- ознайомити аспірантів з різними методами сучасної квантової хімії (неемпіричними, теорією функціоналу густини, напівемпіричними, молекулярної механіки) для їх використання в розрахунку взаємодії корозивного середовища з поверхнею металів;
- розглянути застосування різних підходів та наближень до моделювання поверхні металів в середовищі на атомно-молекулярному рівні;
- дати аспірантам навички роботи з комп'ютерними програмами квантово-хімічного розрахунку;

2.3. Згідно з вимогами освітньо-професійної програми аспіранти повинні:

Знати:

- сучасні методи квантово-хімічного моделювання взаємодії агресивних середовищ з металами та розрахунку енергетики адсорбційних процесів, а також електронної структури інгібіторів корозії;
- основні наближення до моделювання поверхні металів (кластерний підхід, наближення періодичних умов);
- основні принципи якісної та кількісної інтерпретації розрахованих характеристик атомної та електронної структури систем метал-середовище, а також молекул інгібіторів корозії.

Вміти:

- застосовувати сучасні квантово-хімічні методи для моделювання та розрахунку поверхневих реакцій та процесів, які проходять під час взаємодії металів із корозивним середовищем;
- здійснювати аналіз результатів, отриманих квантово-хімічними програмами та практично застосувати теоретичні знання при прогнозуванні протікання корозійних процесів;
- оцінювати поверхнево-активні властивості перспективних речовин для використання їх в якості інгібіторів корозії металів в різних середовищах.

3. ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Змістовий модуль 1. Передумови та можливості використання теоретичних підходів на атомно-молекулярному рівні для моделювання та розрахунку корозійних процесів.

Тема 1.1. Сучасне молекулярне моделювання в хімії. Загальна характеристика обчислювальних методів комп'ютерної хімії.

Тема 1.2. Опис явищ на межі розділу фаз метал-середовище: адсорбція на поверхні, подвійний електричний шар в електроліті.

Тема 1.3. Закономірності корозійного розчинення металів та сплавів на атомно-молекулярному рівні. Анодне та селективне розчинення металів при наявності корозійно-активних іонів.

Тема 1.4. Комп'ютерне моделювання міжмолекулярних взаємодій. Види взаємодій та методи їх оцінки. Потенціали міжмолекулярних взаємодій.

Змістовий модуль 2. Основні положення та методи квантової хімії.

Тема 2.1. Теоретична база квантової хімії. Рівняння Шредінгера для атомів та молекул. Квантова теорія хімічного зв'язку. Представлення молекулярних орбіталей у вигляді лінійної комбінації атомних орбіталей.

Тема 2.2. Неемпіричні квантово-хімічні методи. Метод Хартрі-Фока.

Тема 2.3. Теорія функціоналу густини. Метод Кона-Шема. Спеціальні квантово-хімічні методи для періодичних структур.

Тема 2.4. Напівемпіричні методи квантової хімії, особливості їх застосування на практиці. Метод молекулярних орбіталей.

Змістовий модуль 3. Методичні підходи до проведення квантово-хімічного розрахунку систем метал-середовище. Моделі поверхні металу.

Тема 3.1. Модель молекулярного кластера та застосування періодичних моделей кристалічного тіла.

Тема 3.2. Вибір розрахункового методу для практичних завдань. Точність методів квантової хімії. Вибір базису розрахунку.

Тема 3.3. Квантово-хімічний опис елементарного акту хімічної реакції. Шлях реакції та координата реакції на потенціальній поверхні. Перехідні стани. Оптимізація геометрії.

Тема 3.4. Індокси реакційної здатності молекул інгібіторів. Методи розрахунку зарядів на атомах. Розгляд квантово-хімічних дискрипторів та їх зв'язок з фізико-хімічними характеристиками.

Змістовий модуль 4. Практичні застосування методів квантової хімії для моделювання корозійних систем та інгібіторів корозії. Сучасне програмне забезпечення квантово-хімічних розрахунків.

Тема 4.1. Використання сучасних комп'ютерних програм для проведення квантово-хімічних розрахунків: HyperChem, Gaussian, PC GAMESS, Moras, NWChem.

Тема 4.2. Практичні розрахунки адсорбції корозивного середовища на поверхні. Адсорбція молекул води та корозійно-активних іонів.

Тема 4.3. Моделювання анодного та селективного розчинення металів і сплавів.

Тема 4.4. Квантово-хімічні розрахунки геометричної та електронної структури молекул інгібіторів. Прогнозування їх інгібуючої здатності на основі аналізу квантово-хімічних дискрипторів.

4. ПРАКТИЧНІ ЗАНЯТТЯ

Обсяг в годинах	Назва та стислий зміст роботи	Мета роботи
2	Ознайомлення з сучасними комп'ютерними програмами для проведення квантово-хімічних розрахунків.	Ознайомитися з програмними засобами візуалізації молекулярних структур. Навчитися працювати в програмах HyperChem та MORAC. Побудувати геометричні структури простих молекул та провести їх оптимізацію.
2	Практичні квантово-хімічні розрахунки адсорбції молекули води та іонів хлору на поверхні міді.	Провести розрахунки електронної структури молекул води та молекулярних комплексів програмою HyperChem. Побудувати файл даних з геометричною структурою кластеру міді з адсорбованими компонентами. Провести оптимізацію геометрії кластерів з адсорбованими компонентами в програмі GAMESS.
2	Практичні квантово-хімічні розрахунки розчинення кластеру міді за впливу іонів хлору.	Провести оптимізацію кластерів міді з іоном хлору та побудувати криву виходу комплексу в середовище. Розрахувати енергетичні бар'єри десорбції комплексів мідь-молекула води та мідь-іон хлору з поверхні мідних кластерів.
2	Квантово-хімічні розрахунки геометричної та електронної структури молекул інгібіторів.	Побудувати геометричну структуру органічного інгібітора в програмі Chemcraft та провести її оптимізацію. Розрахувати електронну структуру органічного інгібітора та віддалі, а також провести розподіл зарядів на атомах молекули. Оцінити інгібуючу здатність молекули інгібітора за розрахованими індексами реакційної здатності.

5. САМОСТІЙНА РОБОТА

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
1	Робота над індивідуальними завданнями	5
2	Підготовка і написання рефератів	5
3	Підготовка до навчальних занять та контрольних заходів	5
4	Підготовка до екзамену	5
	Разом	20

6. РОЗПОДІЛ БАЛІВ

Максимальна оцінка в балах				
Поточний контроль (ПК)		Екзаменаційний контроль		Разом за дисципліну
Лабораторні роботи (вказуються різні форми поточного контролю та максимальні бали за виконані завдання)	Разом за ПК	письмова компонента	усна компонента	
	30	70		100

7. ШКАЛА ОЦІНЮВАННЯ ЗНАТЬ

Для оцінки якості засвоєння дисципліни в РСО запроваджена 100 бальна шкала. Шкали оцінювання та визначення навчання наведені в наступній таблиці:

Шкала оцінювання: національна та ECTS

Національна	Університетська (в балах)	ECTS	Визначення ECTS	Рекомендована система оцінювання
Відмінно	90-100	A	Відмінно – відмінне виконання лише з незначною кількістю помилок	90-100 (відмінно)
Добре	82-89	B	Дуже добре - вище середнього рівня з кількома помилками	75-89 (добре)
	75-81	C	Добре – в загальному правильна робота з певною кількістю грубих помилок	
Задовільно	67-74	D	Задовільно – непогано, але зі значною кількістю недоліків	60-74 (задовільно)
	60-66	E	Достатньо - виконання задовольняє мінімальні критерії	
Незадовільно	35-59	FX	Незадовільно - потрібно попрацювати перед тим, як отримати залік або скласти екзамен	35-59 (незадовільно із можливістю повторного складання екзамену)
	0-34	F	Незадовільно – необхідна серйозна подальша робота	0-34 (незадовільно із обов'язковим повторним вивченням модуля)

8. НАВЧАЛЬНО-МЕТОДИЧНЕ ЗАБЕЗПЕЧЕННЯ ДИСЦИПЛІНИ

Основна література:

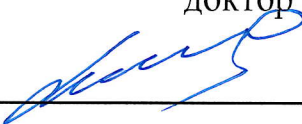
1. Цирельсон В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела: Уч. пособие. М: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2010, 495 с.
2. Ибрагимов И.М., Ковшов А.Н., Назаров Ю.Ф. Основы компьютерного моделирования наносистем. Санкт-Петербург: Лань, 2010, 377 с.
3. Соловьев М.Е., Соловьев М.М. Компьютерная химия. М: Солон-Пресс, 2005, 535 с.
4. Дункен Х., Лыгин В. Квантовая химия адсорбции на поверхности твердых тел. М: Мир, 1980, 288 с.
5. Кобычев В. Б. Квантовая химия на ПК. Компьютерное моделирование молекулярных систем. Иркутск: 2006, 88 с.
6. Кларк Т. Компьютерная химия. М: Мир, 1990, 385 с.

Додаткова література:

1. Туровська О.М., Туровський М.А. Практикум з квантової хімії. Донецьк: ДонНУ, 2007, 81 с.
2. Туровський М.А., Пастернак О.М. Комп'ютерна структурна хімія. Донецьк: ДонНУ, 2009, 153 с.
3. Корній С. Особливості використання методів квантової хімії до розрахунку систем метал–корозивне середовище// Фіз.-хім. механіка матеріалів. Спец. випуск № 10. – 2014.– Т.1. – С. 39-46.
4. Корній С. Квантово-хімічне моделювання корозійного розчинення поверхні інтерметаліду CuAl_2 // Фіз.-хім. механіка матеріалів. Спец. випуск № 11. – 2016.– С. 9-14.
5. Сатанин А.М. Введение в теорию функционала плотности. Учебно-методическое пособие. Нижний Новгород, 2009, 64 с.
6. Molecular modeling of corrosion processes. Scientific Development and Engineering Applications. Edited by Christopher D. Taylor and Philippe Marcus. Wiley, 2015, 256 p.

«ПОГОДЖЕНО»

Завідувач випускової кафедри
доктор технічних наук, професор


Мирослав ХОМА