

НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ  
ФІЗИКО-МЕХАНІЧНИЙ ІНСТИТУТ ім. Г.В. КАРПЕНКА



«ЗАТВЕРДЖУЮ»  
Директор ФМІ НАН України  
З.Т. Назарчук  
«Вересня» 2024 р.

**РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ  
(СИЛАБУС)**

**Методи моделювання процесів на межі розділу фаз на  
атомно-молекулярному рівні**

рівень вищої освіти третій (доктор філософії)

галузь знань 16 Хімічна та біоінженерія

/шифр і назва/

спеціальність 161 Хімічні технології та інженерія

/шифр і назва /

спеціалізація Хімічний опір матеріалів та захист від корозії

/шифр і назва /

вид дисципліни обов'язкова

(обов'язкова / за вибором)

мова викладання українська

Львів – 2024 рік

**Робоча програма навчальної дисципліни (Силабус)**  
**«Методи моделювання процесів на межі розділу фаз на атомно-молекулярному рівні»**

**1. Реквізити навчальної дисципліни**

<b>Галузь знань</b>	16 Хімічна та біоінженерія
<b>Спеціальність</b>	161 Хімічні технології та інженерія
<b>Освітня програма</b>	Хімічні технології та інженерія
<b>Рівень вищої освіти</b>	Третій (доктор філософії)
<b>Статус дисципліни</b>	Обов'язкова
<b>Форма навчання</b>	Змішана
<b>Рік підготовки, семестр</b>	1 курс, весняний семестр
<b>Обсяг дисципліни</b>	3 кредити (90 годин)
<b>Семестровий контроль/ контрольні заходи</b>	Екзамен
<b>Мова викладання</b>	Українська
<b>Інформація про керівника курсу / викладачів</b>	Лектор: д.т.н., завідувач відділу Корній Сергій Андрійович, <a href="mailto:korniy_sergiy@ukr.net">korniy_sergiy@ukr.net</a> , Практичні: д.т.н., завідувач відділу Корній Сергій Андрійович, <a href="mailto:korniy_sergiy@ukr.net">korniy_sergiy@ukr.net</a> ,
<b>Розміщення курсу</b>	<a href="http://www.ipm.lviv.ua">www.ipm.lviv.ua</a> ; вільний доступ

**2. Структура навчальної дисципліни**

Найменування показників	Всього годин
Кількість кредитів/год.	3/90
Усього годин аудиторної роботи, у т.ч.:	60
• лекційні заняття, год.	32
• семінарські заняття, год.	–
• практичні заняття, год.	28
• лабораторні заняття, год.	–
Усього годин самостійної роботи, у т.ч.:	30
• контрольні роботи, к-сть/год.	–
• розрахункові (розрахунково-графічні) роботи, к-сть/год.	15
• індивідуальне науково-дослідне завдання, к-сть/год.	5
• підготовка до навчальних занять та контрольних заходів, год.	10
Екзамен	1
Залік	–

### 3. Опис навчальної дисципліни, мета, завдання та результати.

Навчальна дисципліна «**Методи моделювання процесів на межі розділу фаз на атомно-молекулярному рівні**» розроблена для аспірантів зі спеціалізації «Хімічний опір матеріалів та захист від корозії» і має на меті надати їм необхідні знання з сучасних методів молекулярного моделювання процесів, які проходять на межі розділу метал–корозивне середовище для їх використання у наукових дослідженнях в галузі корозії та протикорозійного захисту матеріалів. Аспіранти матимуть змогу також освоїти нові квантово-хімічні методи та програми для практичних розрахунків геометричної та електронної будови, фізико-хімічних характеристик досліджуваних сполук та металевих кластерів і прогнозувати їх реакційну здатність та корозійні властивості.

#### 3.1. Мета та завдання вивчення навчальної дисципліни

Метою викладання навчальної дисципліни «**Методи моделювання процесів на межі розділу фаз на атомно-молекулярном рівні**» є поглиблене вивчення атомно-молекулярних механізмів взаємодії компонентів середовища з металами, застосовуючи закони квантової хімії та молекулярної механіки, а також використання набутих знань для практичних розрахунків та моделювання елементарних стадій процесів, що протікають на межі розділу фаз метал-середовище. В ході вивчення дисципліни аспірант повинен освоїти сучасні розрахункові комп'ютерні програми і обчислювальні алгоритми, вміти їх застосовувати для вирішення тих проблем, які виникають при виконанні дисертаційної роботи.

Основні завдання навчальної дисципліни:

- ознайомити аспірантів з атомно-молекулярними процесами, які проходять на поверхні металів під час їх взаємодії із корозивним середовищем;
- ознайомити аспірантів з різними методами сучасної квантової хімії та молекулярної механіки (неемпіричними, теорією функціоналу густини, напівемпіричними) 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 розрахунку та візуалізації молекулярних структур.

#### 3.2 Результати навчальної дисципліни

**Після засвоєння навчальної дисципліни аспіранти мають продемонструвати такі результати навчання:**

**знання:** квантово-хімічних методів розрахунків молекулярної структури і властивостей молекул та металевих кластерів; наближень що використовуються при розробці цих методів; фізичної та хімічної природи зв'язків метал-середовище.

**уміння:** проводити базові квантово-хімічні розрахунки різними методами (напівемпіричні і неемпіричні методи); вибирати потрібну інформацію для проведення розрахунків електронної структури систем метал-середовище та аналізувати отримані дані розрахунків; орієнтуватися у науковій літературі, що стосується квантово-хімічних розрахунків процесів, які проходять на поверхні металів; застосовувати отримані знання на практиці для вирішення теоретичних і прикладних задач корозії металів та сплавів.

**досвід:** користування сучасними програмами візуалізації молекул та атомної структури поверхні металів, розрахунковими програмами на персональному комп'ютері; інтерпретації розрахунків для визначення геометричних та енергетичних характеристики молекул та кластерів.

## **Вивчення навчальної дисципліни передбачає формування та розвиток у аспірантів таких компетентностей:**

### **Загальні компетентності**

ЗК01. Здатність до абстрактного мислення, аналізу, синтезу та оцінювання сучасних наукових досягнень, генерування нових знань при вирішенні дослідницьких і практичних завдань.

ЗК02. Здатність проведення досліджень на відповідному рівні.

ЗК03. Здатність генерувати нові ідеї (креативність).

ЗК05. Здатність співпрацювати у професійному середовищі для реалізації завдань дослідження (збір та опрацювання даних, представлення та обговорення результатів).

ЗК06. Здатність набувати універсальні навички дослідника, зокрема усної та письмової презентації результатів власного наукового дослідження українською мовою, застосування сучасних інформаційних технологій у науковій діяльності, пошуку та критичного аналізу інформації.

ЗК08. Здатність опанування іноземної мови в обсязі достатньому для представлення та обговорення результатів своєї наукової роботи в усній та письмовій формі, а також для повного розуміння іншомовних наукових текстів з вибраних напрямків досліджень

### **Фахові компетентності**

ФК01. Здатність виконувати оригінальні дослідження, досягати наукових результатів, які створюють нові знання у хімічній технології та інженерії, зокрема розробляти нові підходи для моделювання корозії матеріалів.

ФК02. Здатність виявляти, ставити та вирішувати проблеми у сфері хімічного опору матеріалів та захисту від корозії, вибирати перспективні напрямки моделювання та розрахунків взаємодії середовища з металами та забезпечувати їх якість.

ФК03. Здатність отримувати доступ до відповідних документів та текстів для вирішення відповідних задач у сфері хімічного опору матеріалів та захисту від корозії, аналізувати та поєднувати інформацію з різних джерел, які стосуються тематики моделювання адсорбційної взаємодії з поверхнею металів.

ФК04. Здатність до розробки технологічних показників одержання і практичного застосування методів та засобів моделювання для прогнозування властивостей нових функціональних матеріалів.

### **Програмні результати навчання**

РН01. Мати передові концептуальні та методологічні знання з хімічних технології та інженерії, зокрема в галузі корозії матеріалів, а також дослідницькі навички, достатні для проведення наукових і прикладних досліджень на рівні останніх світових досягнень з відповідного напрямку, отримання нових знань та/або здійснення інновацій.

РН02. Планувати і виконувати експериментальні та/або теоретичні дослідження корозії матеріалів та дотичних міждисциплінарних напрямів з використанням сучасних інструментів, критично аналізувати результати власних досліджень і результати інших дослідників у контексті усього комплексу сучасних знань щодо досліджуваної проблеми.

РН04. Знати науково обґрунтовані критерії працездатності матеріалів та виробів; фізико-хімічних явищ, які зумовлюють корозійну деградацію матеріалів; умов експлуатації, які спричиняють зниження працездатності виробів, методи і засоби технічної діагностики стану матеріалів і виробів.

РН08. Досліджувати і моделювати явища та процеси у складних хіміко-технологічних та корозійних системах. Узагальнювати експериментальні дані та здійснювати їх оцінку на предмет значимості і співвідношення з відповідною теорією.

РН09. Планувати й ефективно проводити інформаційно-пошукову роботу в рамках власного дослідження із використанням універсальних і спеціалізованих ресурсів наукової

інформації, застосовуючи наукометричні показники і відповідне програмне забезпечення. Здійснювати пошук, аналізувати і критично оцінювати інформацію з різних джерел.

PH10. Самостійно виконувати наукові дослідження та застосовувати дослідницькі навички за професійною тематикою.

PH11. Аргументувати вибір методів розв'язування спеціалізованих завдань, критично оцінювати отримані результати та захищати прийняті рішення.

PH12. Ефективно планувати час для отримання необхідних результатів, що підтверджено відповідним звітуванням та остаточним захистом.

PH13. Визначати ціннісні та етичні засади наукової діяльності й керуватись ними у власному дослідженні.

PH15. Вміти доступно, на високому науковому рівні доносити сучасні наукові знання та результати досліджень до професійної та непрофесійної аудиторії.

PH16. Представляти результати наукових досліджень через публікації у фахових рецензованих виданнях, в тому числі, внесених до наукометричних баз даних (наприклад, Scopus, Web of Science тощо).

PH18. Дотримуватись етичних норм, авторського права та норм академічної доброчесності під час наукових досліджень, презентації результатів, у своїй науково-педагогічній діяльності загалом.

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

Для успішного засвоєння дисципліни аспіранту необхідні знання та уміння, що були отримані під час вивчення дисциплін «Іноземна мова професійного спрямування», «Організація наукової діяльності», «Менеджмент і презентація наукових та освітніх проектів».

Навчальна дисципліна є підготовчою для написання кваліфікаційної роботи аспіранта.

#### **Перелік попередніх та супутніх і наступних навчальних дисциплін**

<b>№ з/п</b>	<b>Попередні навчальні дисципліни</b>	<b>Супутні і наступні навчальні дисципліни</b>
1.	Іноземна мова професійного спрямування	Теоретичні основи електрохімічних методів дослідження корозії металів.
2.		Основні принципи розроблення методів та засобів протикорозійного захисту металів.
3.		Сучасні екологічно чисті інгібітори корозії та корозійно-механічного руйнування.

#### **5 Анотація навчальної дисципліни**

Навчальна дисципліна «**Методи моделювання процесів на межі розділу фаз на атомно-молекулярном рівні**» відноситься до розділу хімії «Обчислювальна хімія», що використовує принципи інформатики для розв'язку хімічних задач на основі результатів теоретичної хімії, що включені в комп'ютерні програми для розрахунків хімічної структури, хімічних та фізичних властивостей речовин та їх сумішей у різних агрегатних станах.

На сьогодні методи обчислювальної хімії широко впроваджуються як в теоретичні так і в практичні дослідження у всіх галузях хімічних технологій. На практиці використання підходів обчислювальної хімії дає змогу отримати низку фізико-хімічних параметрів, зокрема, теплоти утворення речовин, дипольні моменти, потенціали іонізації, енергії вищої занятої та нижчої вакантної орбіталей, енергії адсорбції, енергії зв'язку метал-середовище. Отримані параметри дозволяють розраховувати теплові ефекти хімічних процесів, прогнозувати реакційну здатність досліджуваних сполук та їхні окиснювально-відновні властивості. Методи молекулярного моделювання дають змогу визначити оптимальну електронну та геометричну

будову молекул та проміжних продуктів реакцій на поверхні металів у середовищах. Сучасні комп'ютери, обчислювальні алгоритми та програми дозволяють виконувати розрахунки структури будь-яких реальних органічних та неорганічних молекул та сполук, їх фізико-хімічних та спектральних властивостей, дослідження реакційних шляхів, хімічної кінетики та термодинаміки. Сучасні розрахункові методи квантової хімії дають змогу розраховувати УФ- та ІЧ-спектри досліджуваних хімічних сполук та порівнювати їх з практичними результатами. Застосовуючи теоретичні розрахунки можна обчислювати енергії активації та термодинамічні параметри процесів корозії. Освоївши курс «Методи моделювання процесів на межі розділу фаз на атомно-молекулярному рівні» аспіранти можуть застосовувати методи молекулярного моделювання для вирішення багатьох завдань, які стоять перед ними при виконанні дисертаційної роботи.

## 6. Опис навчальної дисципліни

### 6.1. Лекційні заняття

№ з/п	Зміст заняття	Кількість годин
1.	1.1. Вступ. Передумови та можливості використання теоретичних підходів на атомно-молекулярному рівні для моделювання та розрахунку корозійних процесів. 1.2. Сучасне молекулярне моделювання в хімії. Загальна характеристика обчислювальних методів комп'ютерної хімії. 1.3. Мета та завдання комп'ютерного моделювання. 1.4. Основні поняття: модель, моделювання ("modelling" чи "simulation"), комп'ютерний експеримент, обчислювальне матеріалознавство (computational materials science). 1.5. Молекулярне моделювання процесів корозії металів.	3
2.	2.1. Опис явищ на межі розділу фаз метал-середовище. 2.2. Адсорбція на поверхні твердого тіла, види адсорбції. 2.3. Подвійний електричний шар в електроліті. 2.4. Енергія адсорбції. Рівняння Гіббса-Гельмгольца. 2.5. Опис корозійно-адсорбційної взаємодії на атомно-молекулярному рівні.	3
3.	3.1. Комп'ютерне моделювання міжмолекулярних взаємодій. 3.2. Види міжатомних взаємодій та методи їх оцінки. 3.3. Потенціали міжмолекулярних взаємодій. 3.4. Типи хімічного зв'язку.	3
4.	4.1. Закономірності корозійного розчинення металів та сплавів на атомно-молекулярному рівні. 4.2. Анодне та селективне розчинення металів при наявності корозійно-активних іонів. 4.3. Термодинамічна можливість хімічної та електрохімічної корозії. 4.4. Моделі подвійного електричного шару на межі метал-електроліт. 4.5. Теоретична база корозійного розчинення металів	3
5.	5.1. Основні положення та методи квантової хімії. 5.2. Теоретична база квантової хімії. Рівняння Шредінгера для атомів та молекул. 5.3. Квантова теорія хімічного зв'язку. 5.4. Представлення молекулярних орбіталей у вигляді лінійної комбінації атомних орбіталей.	3
6.	6.1. Основні наближення квантової хімії. 6.2. Неемпіричні квантово-хімічні методи. Метод Хартрі-Фока. 6.3. Теорія функціоналу густини. Метод Кона-Шема.	3

	6.4. Спеціальні квантово-хімічні методи для періодичних структур.	
7.	7.1. Напівемпіричні методи квантової хімії, особливості їх застосування на практиці. 7.2. Метод молекулярних орбіталей. 7.3. Метод молекулярної механіки 7.4. Модель силового поля. Можливості та обмеження моделі силового поля для розрахунку параметрів молекул.	3
8.	8.1. Методичні підходи до проведення квантово-хімічного розрахунку систем метал-середовище. 8.2. Моделі поверхні металу. Модель молекулярного кластера. 8.3. Застосування періодичних моделей кристалічного тіла. 8.4. Вибір розрахункового методу для практичних завдань. Точність методів квантової хімії. 8.5. Вибір базису розрахунку.	3
9.	9.1. Квантово-хімічний опис елементарного акту хімічної реакції. 9.2. Шлях реакції та координата реакції на потенціальній поверхні. Перехідні стани. 9.2. Оптимізація геометрії молекулярної структури. 9.3. Поверхні потенційної енергії, локальні та глобальні мінімуми, перехідний стан реакції. 9.4. Енергія взаємодії, енергія аквації взаємодії.	3
10.	10.1. Застосування методів квантової хімії для розрахунку молекулярної структури інгібіторів корозії. 10.2. Локальні та глобальні індекси реакційної здатності молекул інгібіторів. 10.3. Методи розрахунку зарядів на атомах. 10.4. Розподіл електронної густини. Молекулярний електростатичний потенціал. 10.5. Розгляд квантово-хімічних дискрипторів та їх зв'язок з фізико-хімічними характеристиками.	5
<b>Усього годин</b>		<b>32</b>

## 6.2 Практичні заняття

№ з/п	Назва заняття	Кількість годин
1.	Практичні навички застосування методів квантової хімії для моделювання корозійних систем та інгібіторів корозії. Загальні принципи роботи з сучасним програмним забезпеченням квантово-хімічних розрахунків.	5
2.	Ознайомлення з сучасними комп'ютерними програмами для проведення квантово-хімічних розрахунків. Використання комп'ютерних програм для проведення квантово-хімічних розрахунків: HyperChem, Gaussian, PC GAMESS, Morac, NWChem.	5
3.	Практичні розрахунки адсорбції корозивного середовища на поверхні. Побудова кластеру металу. Розрахунок адсорбції молекули води та корозійно-активних іонів хлориду на поверхні міді.	5
4.	Кластерне моделювання анодного та селективного розчинення металів і сплавів. Практичний квантово-хімічний розрахунок розчинення кластеру міді за впливу іонів хлориду.	5

5.	Побудова геометричної структури органічного інгібітора в програмі Chemcraft та проведення її оптимізації методом молекулярної механіки.	5
6.	Проведення квантово-хімічних розрахунків геометричної та електронної структури молекул інгібіторів. Прогнозування їх інгібуючої здатності на основі аналізу квантово-хімічних дискрипторів.	3
<b>Усього годин</b>		28

### 6.3 Самостійна робота

№ з/п	Найменування робіт	Кількість годин
1.	Підготовка до лекційних занять за темами робочої програми	10
2.	Підготовка до практичних занять	10
3.	Індивідуальні розрахунки геометричної та електронної структури молекулярної системи	10
<b>Усього годин</b>		58

### 7. Методи діагностики знань

1. Опитування та допуск до виконання практичних робіт.
2. Захист практичних робіт, в тому числі виконаних за індивідуальними завданнями.
3. Екзаменаційний контроль з письмовою та усною компонентами.

### 8. Критерії оцінювання результатів навчання студентів

Максимальна оцінка в балах				
Поточний контроль (ПК)		Екзаменаційний контроль		Разом за дисципліну
Форма поточного контролю та максимальні бали за виконані завдання	Разом за ПК	письмова компонента	усна компонента	
Підготовка, виконання та захист звітів з практичних робіт: – 1-2 бали за групову роботу; – 2-3 бали за роботу, виконану за індивідуальним завданням.	40	50	10	100

### Шкала оцінювання: національна та ECTS

Сума балів за навчальну діяльність	Оцінка ECTS	Оцінка за національною шкалою
90-100	+A, A, -A	Відмінно
82-89	+B, B, -B	Дуже добре
74-81	+C, C, -C	Добре
64-73	+D, D, -D	Задовільно
60-63	E	Достатньо
35-59	FX	(незадовільно) з можливістю повторного складання
0-34	F	(незадовільно) з обов'язковим повторним курсом



## 9. Навчально-методичне забезпечення

1. Вказівки до виконання практичних робіт.
2. Завдання до проведення практичних робіт.

## 10. Рекомендована література Базова

1. Математичне та комп'ютерне моделювання в хімії: підручник / Й. О. Опейда. — Вінниця: ДонНУ, 2015. — 388 с.
2. Квантова хімія: навчальний посібник / Й. О. Опейда. — Вінниця: ДонНУ імені Василя Стуса, 2017. — 212 с.
3. Комп'ютерна структурна хімія: навчальний посібник / М.А. Туровський, О.М. Пастернак. Донецьк: ДонНУ, 2009. —153 с.
4. Molecular modeling of corrosion processes. Scientific Development and Engineering Applications. Taylor Ch. D., Marcus P. (Ed.). New York: Wiley, 2015. 272 p.
5. Taylor Ch.D. Atomistic Modeling of Corrosion Events at the Interface between a Metal and Its Environment. *International Journal of Corrosion*. 2012. Vol. 2012, Article ID 204640. 13 p.
6. Слета Л.О., Іванов В.В. Квантова хімія - Харків: Гімназія, 2008. - 443 с.
7. Стрижак П.Є. Квантова хімія: Підр. Для студентів вищих навчальних закладів. – К.: Вид. дім «Києво-Могилянська академія», 2009. -458 с.
8. Основи квантової хімії (Навчально-методичний посібник) / [Електронний ресурс] / Курта С.А., Хацевич О.М. / Факультет природничих наук; ДВНЗ “Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника”. - Івано-Франківськ, 2018. – 235 с.
9. Яцимирський К.Б., Яцимирский В.К. Хімічний зв'язок. К. Вища школа. 1992. с. 246.
10. Computational materials science: an introduction / June Gunn Lee // Second edition. | Boca Raton : CRC Press, Taylor & Francis, 2017. – 351 p.

## Допоміжна

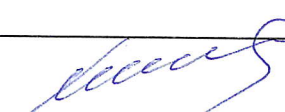
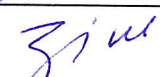
1. Туровська О.М., Туровський М.А. Практикум з квантової хімії. Донецьк: ДонНУ, 2007, 81 с.
2. Корній С. Особливості використання методів квантової хімії до розрахунку систем метал–корозивне середовище// Фіз.-хім. механіка матеріалів. Спец. випуск № 10. – 2014.– Т.1. – С. 39-46.
3. Корній С. Квантово-хімічне моделювання корозійного розчинення поверхні інтерметаліду  $\text{CuAl}_2$ // Фіз.-хім. механіка матеріалів. Спец. випуск № 11. – 2016.– С. 9-14.
4. Gece G. The use of quantum chemical methods in corrosion inhibitor studies. *Corrosion Science*. 2008. Vol. 50, Iss. 11. P. 2981–2992.
5. Koper, M.T.M. Ab initio quantum-chemical calculations in electrochemistry. *Modern aspects of electrochemistry (No. 36)*. Vayenas C.G., Conway B.E., White R.E. and Gamboa-Adelco M.E. (Ed.). New York: Kluwer Academic Publishers, 2004. P. 51–130.

## 9. Інформаційні ресурси

1. GAMESS. The General Atomic and Molecular Electronic Structure System is a general ab initio quantum chemistry package. <http://www.msg.ameslab.gov/GAMESS/GAMESS.html/>.
2. ChemCraft. The graphical program for working with quantum chemistry computations. <https://www.chemcraftprog.com>.
3. MOPAC (Molecular Orbital PACKage). Semiempirical quantum chemistry program based on Dewar and Thiel's NDDO approximation. <http://www.openmopac.net/>.

4. Q-Chem. Ab initio quantum chemistry software package for fast and accurate simulations of molecular systems, including electronic and molecular structure, reactivities, properties, and spectra. <https://www.q-chem.com/>.
5. MOLPRO. A comprehensive system of ab initio programs for advanced molecular electronic structure calculations. <https://www.molpro.net/>.
6. GAUSSIAN. A general purpose computational chemistry software package. <https://gaussian.com/>.

#### 10. Узгодження з іншими навчальними дисциплінами

№ з/п	Назва навчальної дисципліни, щодо якої проводиться узгодження	Прізвище та ініціали викладача	Підпис
1.	Теоретичні основи електрохімічних методів дослідження корозії металів.	Хома М.С.	
2.	Основні принципи розроблення методів та засобів протикорозійного захисту металів	Зінь І.М.	

**«ПОГОДЖЕНО»**

Завідувач випускової кафедри  
член-кореспондент НАН України,  
доктор технічних наук, професор

  
Мирослав ХОМА