|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  | Кафедра рганічної хімії та технології органічних речовин |
| **Перспективні процеси важкого органічного синтезу** **Робоча програма навчальної дисципліни (Силабус)** |

# Реквізити навчальної дисципліни

|  |  |
| --- | --- |
| Рівень вищої освіти | *Другий (магістерський)* |
| Галузь знань | *16Хімічна та біоінженерія* |
| Спеціальність | 161 Хімічні технології та інженерія |
| Освітня програма | Хімічні технології органічних речовин |
| Статус дисципліни | *Нормативна* |
| Форма навчання | *очна(денна)* |
| Рік підготовки, семестр | *1 курс, осінній семестр* |
| Обсяг дисципліни | *2/60* |
| Семестровий контроль/ контрольні заходи | *залік* |
| Розклад занять |  |
| Мова викладання | *Українська* |
| Інформація про керівника курсу / викладачів | Лектор: доц., к.х.н. Василькевич О.І., vasylkevych@ukr.net |
| Розміщення курсу | <https://do.ipo.kpi.ua/login/?lang=ru>. |

# Програма навчальної дисципліни

# Опис навчальної дисципліни, її мета, предмет вивчання та результати навчання

Програму навчальної дисципліни «Перспективні процеси важкого органічного синтезу» складено відповідно до освітньо-професійної програми підготовки магістрів спеціальності 161 Хімічні технології та інженерія спеціалізації Хімічні технології органічних речовин, за денною формою навчання. Навчальна дисципліна належить до циклу навчальних дисциплін професійної підготовки (нормативні).

Предметом навчальної дисципліни є знайомство з основами комп’ютерних розрахунків індивідуальніх молекул та перебігу хімічних реакцій*.* 2.1. Метою кредитного модуля є формування у студентів здатностей:

* здатність використовувати теоретичні знання й практичні навички природничо-наукових та професійно орієнтованих навчальних дисциплін для оволодіння основами організації та методології розробки та дослідження хіміко-технологічних процесів (КСП – 4);
* здатність використовувати професійно профільовані знання й практичні навички в галузі основ хімічної технології органічних сполук для оцінювання техніко-економічних показників хімічних та хіміко-технологічних процесів (КСП -5);
* здатність використовувати знання, уміння й навички в галузі природничо-наукових дисциплін для теоретичного освоєння професійних дисциплін і вирішення практичних завдань з хімічної технології органічних речовин (КСП -10).
* Згідно з вимогами програми навчальної дисципліни студенти після засвоєння кредитного модуля мають продемонструвати такі результати навчання:

**знання:**

* сучасних хімічних технологій органічного синтезу;
* основних напрямів розвитку хімічних технологій органічного синтезу;
* основних режимів та параметрів сучасних процесів органічного синтезу;
* основних екологічних проблем, пов’язаних із реалізацією технологічних процесів органічного синтезу

**уміння:**

* Використовуючи наукові знання синтезу органiчних речовин, в умовах лабораторії або виробництва, для визначення даних до технічного завдання вмiти сформулювати мету виконання дослідження (створення нового об’єкту, напрямок вдосконалення існуючого, визначення або прогнозування ключових параметрів і властивостей системи та ін.);
* Використовуючи наукові положення хімічних і інженерно-хімічних наук, інформатики, математики, методи досліджень процесів органічного синтезу, комп’ютерного моделювання, в умовах лабораторії або виробництва, розробити програму виконання досліджень технологічного об’єкта (сформулювати адекватну фізичну модель, розробити схему компоновки експериментального обладнання та приладів, визначити групу інформаційних параметрів, способи і послідовність їх визначення та аналізу) з метою одержання даних для складання ТЕО;

**досвід:**

- задати вихідні данні для комп’ютерного розрахунку;

- адекватно інтерпретувати дані комп’ютерних розрахунків.

# 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 елемент-органічних сполук», «Теоретичні основи органічних чистих виробництв», «Кінетика та термодинаміка органічних реакцій», «Загальна хімічна технологія» та «Експериментальні методи дослідження процесів органічного синтезу»? “Основи проектування хімічних виробництв”

# Зміст навчальної дисципліни

Кредитний модуль «Комп’ютерна хмія» складається з 36 годин лекцій та 18 годин практичних занять. Головним завданням курсу є набуття студентами навичок квантово-хімічних і молекулярно-механічних розрахунків органічних молекул и перебігу органічних реакцій. Курс розрахований на закріплення знань, які були отримані за попередні роки навчання в галузі органічної хімії. У ньому узагальнюються и конкретизуються кількісні сторони органічной хімії. Цей курс складається з трьох розділів :

1. Вступ до комп’ютерної хімії.
2. Найбільш важливі практичні розрахункові методи
3. Кількісні енергетичні параметри індивідуальних молекул і реакцій із даних розрахунків

Перший розділ містить дві теми – кількісна сторона хімії, основні підходи, квантова теорія і наближені рішення. У другому розділі нійбільш успішні методи молекулярно-механічних, напівемпірічних, ab initiо та і DFT розрахунків, види функціоналів, вибір базисів. Третій розділ присвячений прикладам вирішення конкретних завдань хімії та хімічної технології за допомогою методів комп’ютерної хімії.

# Навчальні матеріали та ресурси

1. C. J. Cramer *Essentials of Computational Chemistry*, John Wiley & Sons (2002).
2. T. Clark *A Handbook of Computational Chemistry*, Wiley, New York (1985).
3. R. Dronskowski *Computational Chemistry of Solid State Materials*, Wiley-VCH (2005).
4. A.K. Hartmann, [Practical Guide to Computer Simulations](http://www.worldscibooks.com/physics/6988.html), [World Scientific](http://en.wikipedia.org/wiki/World_Scientific) (2009)
5. F. Jensen *Introduction to Computational Chemistry*, John Wiley & Sons (1999).

# Навчальний контент

# Методика опанування навчальної дисципліни (освітнього компонента)

Кредитний модуль «Комп’ютерна хмія» складається з 36 годин лекцій та 18 годин практичних занять. Головним завданням курсу є набуття студентами навичок квантово-хімічних і молекулярно-механічних розрахунків органічних молекул и перебігу органічних реакцій. Курс розрахований на закріплення знань, які були отримані за попередні роки навчання в галузі органічної хімії. У ньому узагальнюються и конкретизуються кількісні сторони органічной хімії. Цей курс складається з трьох розділів :

1. Вступ до комп’ютерної хімії.
2. Найбільш важливі практичні розрахункові методи
3. Кількісні енергетичні параметри індивідуальних молекул і реакцій із даних розрахунків

Перший розділ містить дві теми – кількісна сторона хімії, основні підходи, квантова теорія і наближені рішення. У другому розділі нійбільш успішні методи молекулярно-механічних, напівемпірічних, ab initiо та і DFT розрахунків, види функціоналів, вибір базисів. Третій розділ присвячений прикладам вирішення конкретних завдань хімії та хімічної технології за допомогою методів комп’ютерної хімії.

# Самостійна робота студента/аспіранта

Кожен студент отримує індивідуальне завдання у вигляді розрахункової роботи.

# Політика та контроль

# Політика навчальної дисципліни (освітнього компонента)

Всі вимоги не суперечать законодавству України і відповідають нормативним документам Університету.

# Види контролю та рейтингова система оцінювання результатів навчання (РСО)

Для перевірки засвоєння студентами матеріалу кредитного модуля «Комп’ютерна хмія» рекомендується після вивчення кожного розділу проводити письмове опитування. Всього за семестр необхідно провести три письмові опитування. Також рекомендується провести модульну контрольну роботу. В кінці вивчення курсу рекомендується провести письмовий диф. залік. Письмові завдання, контрольні роботи та залікові білети повинні містити практичні завдання у вигляді задач.

Поточний контроль: експрес-опитування, опитування за темою заняття, МКР, тест тощо

Календарний контроль: провадиться двічі на семестр як моніторинг поточного стану виконання вимог силабусу.

Семестровий контроль: екзамен

Умови допуску до семестрового контролю: мінімально позитивна оцінка за індивідуальне завдання / зарахування усіх лабораторних робіт / семестровий рейтинг більше 75 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 |

# Додаткова інформація з дисципліни (освітнього компонента)

**Робочу програму навчальної дисципліни (силабус):**

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

**Ухвалено** кафедрою ОХ та ТОР (протокол № 3 від 24.11.2020\_)

**Погоджено** Методичною комісією факультету (протокол №2 від 14.10.2020)