

МИНОБРНАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

Аннотированная рабочая программа дисциплины

Вычислительные методы в химии

Направление подготовки
04.03.01 Химия

Квалификация выпускника

Бакалавр

Форма обучения
очная

Томск 2015

1. Код и наименование дисциплины

Б1.В.ОД.7 Вычислительные методы в химии.

2. Цель изучения дисциплины

Цель курса: ознакомление студентов с понятийным аппаратом дисциплины, получение знаний в области теории строения атомов и молекул для их использования при проведении квантово-химических расчетов химических объектов.

3. Год/годы и семестр/семестры обучения.

4 год, 7 семестр

4. Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 зачетные единицы, 144 часа, из которых 68 часов составляет контактная работа обучающегося с преподавателем (34 часа – занятия лекционного типа, 34 часа – практические занятия), 76 часов составляет самостоятельная работа обучающегося. Для студентов проводятся групповые и индивидуальные консультации.

5. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы

Формируемые компетенции (код компетенции, уровень (этап) освоения)	Планируемые результаты обучения по дисциплине
(ПК-5), II уровень способность получать и обрабатывать результаты научных экспериментов с помощью современных компьютерных технологий	З (ПК-5) – II Знать: уравнение Шредингера и основные приближения для решения волнового уравнения; основы молекулярной механики, полуэмпирических методов расчета, неэмпирических методов, теории функционала плотности; виды и основные подходы учета электронной корреляции; способы моделирования химических систем в растворах; функционалы и базисные наборы, позволяющие получать точные геометрию соединений, энергии веществ и другие свойства; У (ПК-5) – II Уметь: применять квантово-химические расчёты для получения данных о молекулах и химических реакциях как в газовой фазе, так и в растворителе и обрабатывать результаты расчетов; понимать границы применимости каждого метода расчета; интерпретировать экспериментально полученные данные ИК- и УФ-спектроскопии; В (ПК-5) – II Владеть: навыками и приемами работы с различными компьютерными программами, позволяющими рассчитывать электронную структуру, геометрические, термодинамические и другие свойства молекул и переходных состояний, ИК- и УФ-спектры, химические сдвиги и другие свойства частиц;

6. Содержание дисциплины и структура учебных видов деятельности

6.1. Структура учебных видов деятельности

№ п/п	Раздел Дисциплины	Всего	Неделя семестра	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу студентов и трудоемкость (в часах)				Самостоятельная работа (час.)
				лекции	Лаборат	Практи ч.	коллоқ.	
МНОГОЭЛЕКТРОННЫЙ АТОМ								
1	Введение.	8		2		2		4
2	Основные понятия квантовой механики	8	2	2		2		4
3	Квантово-механическое описание многоэлектронного атома.	16	3-4	4		4		8
КВАНТОВАЯ ХИМИЯ МОЛЕКУЛЫ								
4	Метод Хартри-Фока.	16	5-6	4		4		8
5	Электронная корреляция.	16	7-8	4		4		8
6	Базисные наборы атомных орбиталей.	16	9-11	4		4		8
7	Теория функционала плотности.	12	12-13	4		2		6
8	Полуэмпирические методы.	12	14	2		4		6
9	Расчет свойств молекул, полные энергии, теплоты образования молекул, расчет энергий атомизации.	10	15	2		2		6
КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ								
10	Поверхность потенциальной энергии реакции.	18	16-17	4		4		10
11	Квантово-химическое описание реакций в жидкой и твердой фазе.	12	18	2		2		8
	ВСЕГО	144		34		34		76

6.2 Содержание дисциплины

Содержание лекционного курса

6.2.1. *Введение в курс «Вычислительные методы в химии».* Исторический очерк. Сложности, опасности и преимущества компьютерной химии. Возможности и недостатки квантово-химических расчетов. Границы применимости расчетов. Обзор современных квантово-химических пакетов программ.

6.2.2. *Основные понятия квантовой механики.* Принцип неопределенности Гейзенберга и вероятностный характер квантовой химии. Основные постулаты квантовой химии: о волновой функции, о способе описания физических величин, об основном уравнении квантовой механики, о возможных значениях физических величин, о среднем значении физической величины, принцип суперпозиции, об антисимметричности волновой функции.

6.2.3. *Квантово-химическое описание многоэлектронных атомов.* Принципы и приближения, позволяющие решить уравнение Шредингера: вариационный принцип, пробная волновая функция, одноэлектронное приближение (приближение независимых частиц). Метод Хартри, принцип метода самосогласованного поля, процедура самосогласования, минусы и недостатки этой теории. Метод Хартри-Фока. Детерминант Слетера. Основные, кулоновские и обменные интегралы волновой функции. Теорема Купманса. Ограниченный и неограниченный метод Хартри-Фока. Сродство к электрону, электронный химический потенциал, электроотрицательность, абсолютная химическая жесткость, принцип жестких и мягких кислот и оснований.

6.2.4. *Теория химической связи. Метод МО ЛКАО.* Гамильтониан молекулы, вклады различных членов уравнения в полную энергию системы. Приближение Борна-Оппенгеймера (адиабатическое приближение). Поверхность потенциальной энергии

молекулы. Расчет энергий вращательных барьеров для простых молекул. Метод Хартри-Фока для молекул (метод МО). Приближение МО ЛКАО. Уравнения Рутаана. Ограничения метода Хартри-Фока.

6.2.5. *Электронная корреляция.* Источники погрешности ССП МО ЛКАО расчетов: несовершенство базисного набора, корреляционная энергия, приближение Борна-Оппенгеймера, релятивистские эффекты. Составляющие электронной корреляции. Пост-хартри-фоковские методы, учитывающие электронную корреляцию: метод конфигурационного взаимодействия, многоконфигурационные методы, теория Меллера-Плессета. Базисные наборы Попла. Расчет энергии диссоциации химических связей.

6.2.6. *Базисные наборы атомных орбиталей.* Иерархия методов квантовой химии. Неэмпирическая квантовая химия. Угловые и радиальные части атомных орбиталей (АО). Вид аналитических базисных функций. Орбитали Слэтера-Зенера: преимущества и недостатки. Орбитали гауссова типа: преимущества и недостатки. Минимальные базисные наборы STO-KG. Валентно-расщепленные базисные наборы M-NPG. Поляризационные базисные наборы. Диффузные функции. Точность квантово-химических расчетов свойств молекул.

6.2.7. *Теория функционала плотности.* Теорема Хоэнберга и Кона. Метод Кона-Шама. Сравнение методов Хартри-Фока и Кона-Шама. Корреляционно-обменный функционал. Гибридные методы.

6.2.8. *Полуэмпирические методы* и основные приближения, используемые в полуэмпирических методах: приближение валентных электронов, приближение нулевого дифференциального перекрытия и его разновидности: CNDO, INDO, MINDO. Метод модифицированного пренебрежения дифференциальным перекрытием и его разновидности: MNDO, AM1, PM3. Разделение π - и σ -электронов, π -электронное приближение. Сравнительная характеристика полуэмпирических методов, анализ их применимости для решения различных химических задач.

6.2.9. *Расчет свойств молекул.* полные энергии, теплоты образования молекул, расчет энергий атомизации.

6.2.10. *Поверхность потенциальной энергии реакции.* Определение поверхности потенциальной энергии (ППЭ) химической реакции как совокупности точек, характеризующих определенной энергией системы при фиксированном положении ядер. Стационарные точки на ППЭ: минимумы, максимумы, точки перегиба. Матрица вторых производных полной энергии молекулы (матрица Гесса). Оптимизация равновесной геометрии молекулы. ППЭ и химическая реакция, элементарный акт химической реакции. Теория переходного состояния химической реакции. Расчет поверхности потенциальной энергии химической реакции. Предсказание энергии активации. Правило Вудворта-Хоффмана. Методы описания химических реакций: теория возмущений, метод координаты реакции, метод граничных молекулярных орбиталей Фукуи. Индексы реакционной способности. Электростатический потенциал.

6.2.11. *Квантово-химическое описание реакций в жидкой и твердой фазе.* Влияние растворителя на профиль ППЭ. Типы сольватации: специфическая и неспецифическая. Энергетика процесса растворения и вклады в полную энергию молекулы в растворителе. Модели учета влияния растворителя. Сольватонная модель. Континуальные модели растворителя, методы самосогласованного реакционного поля: модель реакционного поля Онзагера, РСМ –модель поляризуемого континуума, Модель изоплотности РСМ (IPCM), SCI-PCМ, приближение супермолекулы, метод атом-атомных потенциалов, метод Монте-Карло, модель точечных диполей.

6.3. Форма промежуточной аттестации

Зачет с оценкой.

7. Ресурсное обеспечение дисциплины

7.1 Основная литература

1. Цирельсон, В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела / В. Г. Цирельсон. – М.: Бинوم. Лаборатория знаний, 2010. – 469 с.
2. Бутырская, Е.В. Компьютерная химия: основы теории и работа с программами Gaussian и GaussView. – М.: СОЛОН-ПРЕСС, 2011. – 224 с.

7.2 Дополнительная литература

1. Полещук О. Х. Методические указания к лабораторным работам по компьютерному моделированию химических реакций / О. Х. Полещук, Д. М. Кижнер ; [под ред. В. Д. Филимонова] ; Том. гос. пед. ун-т. - Томск, 2006 -160с.
2. Соловьев М. Е., Соловьев М. М. Компьютерная химия. – М.: Соломон-Пресс -2005.

7.3 Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»

1. <http://webbook.nist.gov/chemistry/>
2. <http://www.chemspider.com/>
3. <http://www.organic-chemistry.org/>
4. <http://www.chem.msu.ru/cgi-bin/tkv.pl?show=welcme.html/welcme.html>

8. Преподаватель (преподаватели):

Автор, Фатеев Александр Владимирович, к.х.н., доцент кафедры физической и коллоидной химии.