

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

Аннотированная рабочая программа дисциплины

Компьютерное моделирование фотоники органических молекул

Направление подготовки

04.04.01 Химия

Магистерская программа

Фундаментальная и прикладная химия веществ и материалов

Квалификация

Магистр

Форма обучения

очная

2016

1. Код и наименование дисциплины

Б1.В.ОД.8 Компьютерное моделирование фотоники органических молекул

2. Цель изучения дисциплины изучение теории и методов квантово-химических исследований фотохимических и фотофизических свойств органических молекул. Практические занятия имеют целью изучение программ и методик выполнения квантово-химических расчетов физико-химических свойств органических молекул на персональном компьютере.

3. Год и семестр обучения: 1 год, 2 семестр.

4. Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетных единицы, 108 часов, из которых 28 часов составляет контактная работа обучающегося с преподавателем (6 часов – занятия лекционного типа, 22 часов – занятия семинарского типа) и 80 часов составляет самостоятельная работа обучающегося.

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
ОПК-2, II Владеть современными компьютерными технологиями при планировании исследования, получении и обработке результатов научных экспериментов, сборе, обработке, хранении, представлении и передаче научной информации.	ОПК-2 – II Уметь: – освоить методику выполнения квантово-химических расчетов на персональном компьютере; – уметь обрабатывать, анализировать и интерпретировать результаты расчетов.
ПК-1, I Способность проводить научные исследования по сформулированной тематике, самостоятельно составлять план исследования и получать новые научные и прикладные результаты.	ПК-1 – I Уметь: – выбрать соответствующие программные средства и методики проведения исследования физико-химических свойств органических соединений.
ПК-2, II Владеть теорией и навыками практической работы в избранной области химии	ПК-2 – II Знать: – теоретические основы современных квантово-химических методов исследования физико-химических свойств многоатомных органических соединений. – возможности квантово-химических методов исследования физико-химических свойств многоатомных органических соединений.

6. Содержание дисциплины и структура учебных видов деятельности

6.1. Структура учебных видов деятельности

Наименование разделов и тем	Всего (час.)	Контактная работа (час.)		Самостоятельная работа (час.)
		Лекции	Практические занятия	
Уравнение Шредингера для многоатомной молекулы.	4	1	-	3
Метод молекулярных орбиталей. Распределение электронной плотности.	4	1	-	3
Метод Хартри-Фока-Рутана (ССП-МО-ЛКАО).	4	1	-	3
Метод ЧПДП для расчетов возбужденных электронных состояний органических молекул	4	1	-	3
Метод молекулярного электростатического потенциала	4	1	-	3
Фотофизические процессы. Расчеты констант скорости фотофизических процессов	4	1	-	3
Практическая работа по расчету декартовых координат атомов в многоатомной молекуле	10	-	4	6
Практическая работа по расчету электронной структуры и спектров многоатомной молекулы квантово-химическим методом ЧПДП со спектроскопической параметризацией	14	-	4	10
Практическая работа по расчету констант скорости фотофизических процессов в многоатомной молекуле	13	-	3	10
Практическая работа по расчету молекулярного электростатического потенциала и оценке протон-акцепторной способности молекулы	14	-	4	10
Практическая работа по расчету заселенностей химических связей в основном и возбужденных электронных состояниях молекулы	10	-	2	8
Обработка и интерпретация результатов квантово-химических расчетов молекул. Оформление научного отчета по выполненному исследованию физико-химических свойств многоатомной молекулы	23	-	5	18
Итого:	108	6	22	80

6.2. Содержание дисциплины

Раздел 1.

Теоретические основы квантовой химии. Квантовая химия - квантовая механика

молекул. Исторический обзор развития квантовой химии. Основные постулаты квантовой химии. Операторы физических величин, волновые функции, собственные значения, линейная матричная алгебра. Проблема расчета и интерпретации физических и химических свойств молекул.

Раздел 2.

Уравнение Шредингера для водородоподобных атомов. Квантовые числа, собственные функции, энергетические уровни и состояния. Электронные конфигурации многоэлектронных атомов. Спин электрона и принцип Паули.

Раздел 3.

Уравнение Шредингера для многоатомной молекулы. Основные приближения методов квантовой химии: нерелятивистский гамильтониан, адиабатическое приближение Борна-Оппенгеймера, одноэлектронное приближение. Детерминантные многоэлектронные волновые функции Слейтера.

Раздел 4.

Метод Хартри-Фока. Уравнения Хартри-Фока. Способы решения и принцип самосогласованного поля. Итерационная процедура.

Раздел 5.

Метод молекулярных орбиталей. Представление молекулярной орбитали в виде линейной комбинации атомных орбиталей. Типы атомных орбиталей, используемых в квантово-химических расчетах молекул: слейтеровские и гауссовские атомные орбитали.

Раздел 6.

Распределение электронной плотности. Электронные заселенности атомов и химических связей по Малликену.

Раздел 7.

Метод Рутана (ССП-МО-ЛКАО). Уравнения метода и способы их решения. Интерпретация результатов расчета. Теорема Купменса для потенциалов ионизации молекул. Метод ЭСХА.

Раздел 8.

Электронные состояния молекул. Классификация. Электронные волновые функции возбужденных состояний. Расчет электронных возбужденных состояний.

Раздел 9.

Приближение нулевого дифференциального перекрытия атомных орбиталей. Полуэмпирические методы решения уравнений Рутана с учетом всех валентных электронов.

Раздел 10.

Метод ЧПДП для расчетов возбужденных электронных состояний многоатомных органических молекул. Уравнения метода. Стандартная спектроскопическая система параметров.

Раздел 11.

Метод молекулярного электростатического потенциала (МЭСП) для оценки специфических межмолекулярных взаимодействий. Универсальные и специфические межмолекулярные взаимодействия. Уравнения и приближения метода МЭСП. Область применения метода, преимущества и недостатки.

Раздел 12.

Орбитальная природа и пространственная локализация МО и возбужденных электронных состояний молекул

Раздел 13.

Точность и достоверность результатов расчетов

Раздел 14.

Фотофизические процессы. Квантовые выходы фотопроцессов. Законы и правила люминесценции

Раздел 15.

Волновые функции электронно-колебательных состояний многоатомных молекул. Теория электронных переходов в многоатомных органических соединениях. Расчеты констант скоростей фотофизических процессов. Фосфоресценция органических соединений.

Раздел 16.

Квантово-химическая модель фотолиза химических связей в органических соединениях.

Раздел 17.

Межмолекулярные фотофизические процессы в органических системах. Межмолекулярный перенос энергии электронного возбуждения.

Раздел 18.

Структура пакета квантово-химических программ "Фотоника-Т". Методика и организация квантово-химических расчетов на компьютере.

Содержание практических занятий:

1. Изучение методических рекомендаций и выполнение практической работы по расчету декартовых координат атомов в многоатомной молекуле.

2. Изучение методических рекомендаций и выполнение практической работы по расчету электронной структуры и спектров многоатомной молекулы квантово-химическим методом ЧПДП со спектроскопической параметризацией.

3. Изучение методических рекомендаций и выполнение практической работы по расчету констант скоростей фотофизических процессов в многоатомной молекуле.

4. Изучение методических рекомендаций и выполнение практической работы по расчету молекулярного электростатического потенциала и оценке протонно-акцепторной способности молекулы.

5. Изучение методических рекомендаций и выполнение практической работы по расчету заселенностей химических связей в основном и возбужденных электронных состояниях молекулы.

6. Обработка и интерпретация результатов квантово-химических расчетов молекул. Оформление научного отчета по выполненному исследованию физико-химических свойств многоатомной молекулы.

6.3. Форма промежуточной аттестации: зачет

7. Ресурсное обеспечение

7.1. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

7.1.1. Рекомендуемая литература

а) основная:

1. Компьютерная квантовая химия. Учебно-методическое пособие. – Томск: Томский государственный ун-т, 2010. 128 с. Составители: д.ф.-м.н., проф. В.Я. Артюхов, к.ф.-м.н. Базыль О.К.

б) дополнительная:

1. Майер Г.В., Артюхов В.Я., Базыль О.К., Копылова Т.Н., Кузнецова Р.Т., Риб Н.Р., Соколова И.В. Электронно-возбужденные состояния и фотохимия органических соединений. Новосибирск: Наука, 1997, 231 с.

2. Теренин А.Н. Фотоника молекул красителей. Л.: Наука, 1967. 616 с.

3. Мак-Глинн С., Адзуми Т., Киносита М. Молекулярная спектроскопия триплетного состояния. М.: Мир, 1974. 295 с.

4. Плотников В.Г. Теоретические основы спектрально-люминесцентной систематики молекул. // Успехи химии, 1980. Т. 49, № 2, С. 328-361.

5. Кабачник М.И. Новое в теории кислот и оснований // Успехи химии. 1976. Т. 48. № 9. С. 1523-1547.

7.1.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»

1. <http://vital.lib.tsu.ru/vital/access/manager/Index>
2. <http://lib.tsu.ru/ru/elektronnoe-tesursy>
3. <http://lib.tsu.ru/ru/ssylki-internet>
4. <http://www.chem.mgu.su>;
5. <http://www.misis.ru>;
6. io.sfu-kras.ru;
7. <http://www.chem.spbu.ru>.

8. Авторы программы:

Артюхов Виктор Яковлевич, д.-р физ.-мат. наук, профессор кафедры физической и коллоидной химии ХФ ТГУ.

Базыль Ольга Константиновна, канд. физ.-мат. наук, доцент кафедры физической и коллоидной химии ХФ ТГУ.