

Міністерство освіти і науки України  
Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна  
Кафедра хімічного матеріалознавства  
Кафедра неорганічної хімії

“ЗАТВЕРДЖУЮ”

Проректор з науково-педагогічної роботи

\_\_\_\_\_  
“ \_\_\_\_\_ ” \_\_\_\_\_ 2017\_ р.

Робоча програма навчальної дисципліни

**Молекулярне моделювання**

Спеціальність (напрямок) \_\_\_\_\_102 "хімія"\_\_\_\_\_

Факультет \_\_\_\_\_хімічний\_\_\_\_\_

2017 /2018 навчальний рік

Програму рекомендовано до затвердження вченою радою хімічного факультету  
“28” серпня 2017 року, протокол № 7

РОЗРОБНИКИ ПРОГРАМИ:

Іванов Володимир Венедиктович, д.х.н., професор кафедри хімічного матеріалознавства.

Колесник Ярослав Валентинович, к.х.н., доцент кафедри неорганічної хімії.

Калугін Олег Миколайович, к.х.н., професор кафедри неорганічної хімії, декан хімічного факультету,

Програму схвалено на засіданні кафедри неорганічної хімії

Протокол № \_\_\_\_ від “ \_\_\_\_ ” \_\_\_\_\_ 2017 року

В. о. завідувача кафедри неорганічної хімії

\_\_\_\_\_  
(підпис) (В’юнник І.М.)  
(прізвище та ініціали)

Програму схвалено на засіданні кафедри хімічного матеріалознавства

Протокол від “ 28 ” серпня 2017 року № 1

В.о. завідувача кафедри хімічного матеріалознавства

\_\_\_\_\_  
(підпис) Коробов О.І.  
(прізвище та ініціали)

Програму погоджено методичною комісією хімічного факультету

Протокол від “ 28 ” серпня 2017 року № 1

Голова методичної комісії хімічного факультету

\_\_\_\_\_  
(підпис) Єфімов П.В.  
(прізвище та ініціали)

## ВСТУП

Програма навчальної дисципліни “Молекулярне моделювання” складена відповідно до освітньо-професійної програми підготовки бакалавра напрямку 102 – «Хімія»

### 1. Опис навчальної дисципліни

1.1. **Мета** викладання навчальної дисципліни – студентам, які навчаються за напрямом „Хімія” за ОКР бакалавр базових навичок використання теоретичних методів, що реалізовані в певних комп’ютерних програмах. Студенти навчаються як кваліфіковані користувачі персонального комп’ютера та використовують розповсюджені комп’ютерні програми з квантової хімії та молекулярної динаміки для розв’язання типових навчальних та наукових задач.

1.2. **Основними завданнями вивчення дисципліни є**

- вивчення базових понять квантової хімії та молекулярної динаміки;
- знайомство студентів із основними етапами комп’ютерного розрахунку для розв’язання типових навчальних та наукових задач;
- оволодіння розповсюдженими програмними засобами для розв’язання прикладних хімічних задач.

1.3. Кількість кредитів 3

1.4. Загальна кількість годин 90

| 1.5. Характеристика навчальної дисципліни |                                     |
|-------------------------------------------|-------------------------------------|
| Нормативна                                |                                     |
| Денна форма навчання                      | Заочна (дистанційна) форма навчання |
| Рік підготовки                            |                                     |
| 3-й                                       | 3-й                                 |
| Семестр                                   |                                     |
| 6-й                                       | 6-й                                 |
| Лекції                                    |                                     |
| 16 год.                                   | 8 год.                              |
| Практичні заняття                         |                                     |
| 16 год.                                   | 4 год.                              |
| Самостійна робота                         |                                     |
| 58 год.                                   | 78 год.                             |
| Індивідуальні завдання                    |                                     |
| Не передбачено                            |                                     |

1.6. Заплановані результати навчання. У результаті вивчення даного курсу студент повинен:

**знати:** теоретичні основи молекулярного моделювання (квантово-хімічних розрахунків та молекулярно-динамічного моделювання) та існуючі комплекси програм для проведення відповідних розрахунків;

**вміти:** виконувати квантово-хімічні розрахунки властивостей молекул (геометричні, енергетичні характеристики) та молекулярно-динамічне моделювання найпростіших молекулярних та іон-молекулярних систем.

## 2. Тематичний план навчальної дисципліни

### Розділ 1. Виклад теоретичного матеріалу

**Тема 1.** Статистико-механічний опис молекулярних та іон-молекулярних систем. Основи молекулярно-динамічного моделювання конденсованих неупорядкованих систем. Поняття МД комірки. Періодичні граничні умови. Основні етапи МД моделювання. Ініціалізація та врівноваження. Міжчастинкові потенціали. Наближення парних взаємодій. Атом-атомна схема. Короткодійні потенціали та кулонівські взаємодії. Радіус обрізання.

**Тема 2.** Рівняння руху у фазовому просторі. Числові методи розв'язання рівнянь руху: алгоритм Верле, алгоритми для обертового руху. Рівняння руху для молекулярних систем. МД реалізація NVE, NVT та NPT ансамблів.

**Тема 3.** Аналіз результатів моделювання. Термодинамічні властивості МД системи: внутрішня енергія, температура, тиск, ТДХ випаровування рідини та іонної сольватації. Структура молекулярних рідин та іон-молекулярних систем — електролітичних розчинів.

**Тема 4.** Аналіз результатів моделювання. Динамічні та транспортні властивості у МД експерименті. Апарат часових кореляційних функцій, часів релаксації та коефіцієнтів дифузії.

**Тема 5.** Значення квантово-хімічних розрахунків у сучасних хімічних дослідженнях. Класифікація методів квантової хімії. Неємпіричні (*ab initio*) та напівемпіричні методи. Розповсюджені пакети програм. Одноелектронні базиси неємпіричних методів. Уявлення про слейтерівські та гаусові функції. Базиси Попла та Даннінга. Поляризаційні та дифузні добавки до стандартних базисів.

**Тема 6.** Метод Гартрі-Фока. Процедура самоузгодження. Прискорення збіжності ітераційного процесу.

**Тема 7.** Z-матриця. Оптимізація геометрії молекул та комплексів. Методи багатовимірної оптимізації, що використовуються у проблемі пошуку оптимальної геометрії. Коливання молекул. Силова стала. ІЧ, КР спектри. Анггармонізм коливань. Енергії нульових коливань (ZPE). Термохімічні розрахунки.

**Тема 8.** Уявлення про електронну кореляцію. Динамічна та нединамічна кореляції електронів. Електронно-збуджені конфігурації. Конфігураційні функції стану. Наближені методи урахування електронної кореляції. Теорія збурень, метод конфігураційної взаємодії, теорія зв'язаних кластерів. Теорія функціоналу густини.

### Розділ 2. Практичні заняття з молекулярно-динамічного моделювання

**Тема 9.** Знайомство з методикою МД моделювання та програмним комплексом MDNAES.

**Тема 10.** Порівняння структури одноатомних рідин та твердих тіл.

**Тема 11.** Обчислення термодинамічних характеристик молекулярних рідин.

**Тема 12.** Дослідження самодифузії в одноатомних рідинах.

### Розділ 3. Практичні заняття з квантово-хімічних розрахунків

**Тема 13.** Знайомство з програмою для квантово-хімічних розрахунків. Тестові розрахунки методом Гартрі-Фока в різних базисах. Оптимізація геометрії.

**Тема 14.** Розрахунки коливальних спектрів. Візуалізація коливань.

**Тема 15.** Розрахунки з урахуванням електронної кореляції.

**Тема 16.** Термохімічні розрахунки *ab initio*.

### 3. Структура навчальної дисципліни

| Назви розділів                      | Кількість годин |              |    |      |      |       |              |              |    |      |      |       |
|-------------------------------------|-----------------|--------------|----|------|------|-------|--------------|--------------|----|------|------|-------|
|                                     | денна форма     |              |    |      |      |       | заочна форма |              |    |      |      |       |
|                                     | усього          | у тому числі |    |      |      |       | усього       | у тому числі |    |      |      |       |
|                                     |                 | л            | п  | лаб. | інд. | с. р. |              | л            | п  | лаб. | інд. | с. р. |
| 1                                   | 2               | 3            | 4  | 5    | 6    | 7     | 8            | 9            | 10 | 11   | 12   | 13    |
| <b>Розділ 1. Лекційний матеріал</b> |                 |              |    |      |      |       |              |              |    |      |      |       |
| Разом за розділом 1                 | 34              | 16           |    |      |      | 18    | 34           | 8            |    |      |      | 26    |
| <b>Розділ 2. Практичні заняття</b>  |                 |              |    |      |      |       |              |              |    |      |      |       |
| Разом за розділом 2                 | 28              |              | 8  |      |      | 20    | 28           |              | 2  |      |      | 26    |
| <b>Розділ 3. Практичні заняття</b>  |                 |              |    |      |      |       |              |              |    |      |      |       |
| Разом за розділом 3                 | 28              |              | 8  |      |      | 20    | 28           |              | 2  |      |      | 26    |
| <b>Усього годин</b>                 | 90              | 16           | 16 |      |      | 58    | 90           | 8            | 4  |      |      | 78    |

### 4. Теми практичних занять

| № з/п   | Назва теми                                                                                                                               | Кількість Годин |      |
|---------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------|------|
|         |                                                                                                                                          | Денне           | з.в. |
| Тема 9  | Знайомство з методикою МД моделювання та програмним комплексом <b>MDNAES</b>                                                             | 2               | 0.5  |
| Тема 10 | Порівняння структури одноатомних рідин та твердих тіл                                                                                    | 2               | 0.5  |
| Тема 11 | Обчислення термодинамічних характеристик молекулярних рідин                                                                              | 2               | 0.5  |
| Тема 12 | Дослідження самодифузії в одноатомних рідинах                                                                                            | 2               | 0.5  |
| Тема 13 | Знайомство з програмою для квантовохімічних розрахунків. Тестові розрахунки методом Гартрі-Фока в різних базисах. Оптимізація геометрії. | 2               | 0.5  |
| Тема 14 | Розрахунки коливальних спектрів. Візуалізація коливань.                                                                                  | 2               | 0.5  |
| Тема 15 | Розрахунки з урахуванням електронної кореляції.                                                                                          | 2               | 0.5  |
| Тема 16 | Термохімічні розрахунки <i>ab initio</i> .                                                                                               | 2               | 0.5  |
|         | <b>разом</b>                                                                                                                             | 16              | 4    |

### 5 Самостійна робота

| Назва теми                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                              | Кількість годин денне | Кількість годин заочне |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------|------------------------|
| Тема 1. Статистико-механічний опис молекулярних та іон-молекулярних систем. Основи молекулярно-динамічного моделювання конденсованих неупорядкованих систем. Поняття МД комірки. Періодичні граничні умови. Основні етапи МД моделювання. Ініціалізація та врівноваження. Міжчастинкові потенціали. Наближення парних взаємодій. Атом-атомна схема. Короткодійні потенціали та кулонівські взаємодії. Радіус обрізання. | 2                     | 4                      |
| Тема 2. Рівняння руху у фазовому просторі. Числові методи розв'язання рівнянь руху: алгоритм Верле, алгоритми для обертового руху. Рівняння руху для молекулярних систем. МД реалізація NVE, NVT та NPT ансамблів.                                                                                                                                                                                                      | 2                     | 3                      |

|                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                             |           |           |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------|-----------|
| Тема 3. Аналіз результатів моделювання. Термодинамічні властивості МД системи: внутрішня енергія, температура, тиск, ТДХ випаровування рідини та іонної сольватації. Структура молекулярних рідин та іон-молекулярних систем — електролітних розчинів.                                                                                                                                      | 2         | 3         |
| Тема 4. Аналіз результатів моделювання. Динамічні та транспортні властивості у МД експерименті. Апарат часових кореляційних функцій, часів релаксації та коефіцієнтів дифузії.                                                                                                                                                                                                              | 2         | 3         |
| Тема 5. Значення квантово хімічних розрахунків у сучасних хімічних дослідженнях. Класифікація методів квантової хімії. Неємпіричні ( <i>ab initio</i> ) та напівемпіричні методи. Розповсюджені пакети програм. Одноелектронні бази неємпіричних методів. Уявлення про слейтерівські та гаусові функції. Базиси Попла та Даннінга. Поляризаційні та дифузні добавки до стандартних базисів. | 2         | 3         |
| Тема 6. Метод Гартрі-Фока. Процедура самоузгодження. Прискорення збіжності ітераційного процесу.                                                                                                                                                                                                                                                                                            | 2         | 3         |
| Тема 7. Z-матриця. Оптимізація геометрії молекул та комплексів. (аналітичні та чисельні алгоритми). Методи багатовимірної оптимізації, що використовуються у проблемі пошуку оптимальної геометрії. Коливання молекул. Силовa стала. ІЧ, КР спектри. Анггармонізм коливань. Енергії нульових коливань (ZPE).                                                                                | 3         | 3         |
| Тема 8. Уявлення про електронну кореляцію. Динамічна та нединамічна кореляції електронів. Електронно збуджені конфігурації. Конфігураційні функції стану. Наближені методи урахування електронної кореляції. Теорія збурень, метод конфігураційної взаємодії, теорія зв'язаних кластерів. Теорія функціоналу густини.                                                                       | 3         | 4         |
| Тема 9. Знайомство з методикою МД моделювання та програмним комплексом <b>MDNAES</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                                        | 5         | 7         |
| Тема 10. Порівняння структури одноатомних рідин та твердих тіл                                                                                                                                                                                                                                                                                                                              | 5         | 6         |
| Тема 11. Обчислення термодинамічних характеристик молекулярних рідин                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        | 5         | 7         |
| Тема 12. Дослідження самодифузії в одноатомних рідинах                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      | 5         | 6         |
| Тема 13. Знайомство з програмою для квантово-хімічних розрахунків. Тестові розрахунки методом Гартрі-Фока в різних базисах. Оптимізація геометрії.                                                                                                                                                                                                                                          | 5         | 7         |
| Тема 14. Розрахунки коливальних спектрів. Візуалізація коливань.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                            | 5         | 6         |
| Тема 15. Розрахунки з урахуванням електронної кореляції.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    | 5         | 7         |
| Тема 16. Термохімічні розрахунки <i>ab initio</i> .                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         | 5         | 6         |
| <b>Разом</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                | <b>58</b> | <b>78</b> |

## 6. Індивідуальні завдання

Не передбачено навчальним планом.

## 7. Методи контролю

Перевірка результатів лабораторних робіт (звітів). Курсова робота. Семестровий екзамен.

## 8. Схема нарахування балів

1. Студент допускається до підсумкового семестрового контролю (екзамену) за умови виконання та оформлення всіх лабораторних робіт та курсової роботи.
2. Екзамен вважається зданим, якщо рейтинг за екзамен не менше, ніж 20 балів.
3. За пропуск однієї лекції без поважної причини студент втрачає 2 бали від загального рейтингу за семестр.

4. Несвоєчасне виконання або оформлення лабораторної або курсової оцінюється лише в 75% від набраної рейтингової оцінки. Термін подання оформлених лабораторних робіт визначається викладачем, який веде практичні заняття.
5. Термін подання курсової роботи – 15 травня поточного року.

| Поточний контроль, самостійна робота, індивідуальні завдання |          |           |                                                  |                        |       | Екзамен | Сума |
|--------------------------------------------------------------|----------|-----------|--------------------------------------------------|------------------------|-------|---------|------|
| Розділ 1                                                     | Розділ 2 | Розділ 3  | Контрольна робота, передбачена навчальним планом | Індивідуальне завдання | Разом |         |      |
| T1–T8                                                        | T9 – T12 | T13 – T16 |                                                  |                        |       |         |      |
| –                                                            | 30       | 30        | –                                                | –                      | 60    | 40      | 100  |

#### Виконання курсової роботи

| Реферат, висновки | Основна (змістова) частина | Література | Оформлення | Сума |
|-------------------|----------------------------|------------|------------|------|
| 20                | 50                         | 20         | 10         | 100  |

#### Шкала оцінювання

| Сума балів за всі види навчальної діяльності протягом семестру | Оцінка для чотирирівневої шкали оцінювання |
|----------------------------------------------------------------|--------------------------------------------|
| 90 – 100                                                       | відмінно                                   |
| 70 – 89                                                        | добре                                      |
| 50 – 69                                                        | задовільно                                 |
| 1 – 49                                                         | незадовільно                               |

### 9. Рекомендована література

#### Основна література

1. В. В. Иванов, Л. А. Слета. Квантовая химия. Харьков: “Фолио”, 2007, 443 с.
2. О. М. Калугін, Я. В. Колесник. Молекулярно-динамічне моделювання конденсованих неупорядкованих систем: Методичні вказівки з курсу.– Х.: ХНУ імені В. Н. Каразіна, 2006.– 95 с.
3. О. Н. Калугин, М.Н. Волобуев, Я.В. Колесник. MDNAES: Программный комплекс для компьютерного моделирования ион-молекулярных систем методом молекулярной динамики. // Вест. Харьк. ун-та. Химия. – 1999. - № 454. Вып. 4 (27). – С. 58-79.
4. Рапапорт Д.К. Искусство молекулярной динамики/ Пер. с англ. А.Н.Дьяконовой, под науч. ред. Р.Г.Ефремова. – М.: ИКИ, РХД, 2012. – 632 с.
5. M.J. Abraham, D. van der Spoel, E. Lindahl, B. Hess, and the GROMACS development team, *GROMACS User Manual version 5.0.4*, [www.gromacs.org](http://www.gromacs.org) (2014).
6. I.T. Todorov & W. Smith. *THE DL POLY 4 USER MANUAL*. Version 4.06.1. STFC Daresbury Laboratory, Daresbury, Warrington WA4 4AD, Cheshire, England, UK, [www.ccp5.ac.uk/DL POLY](http://www.ccp5.ac.uk/DL_POLY) (2014).
7. A.R. Leach. Molecular modeling. Principles and applications. Addison Wesley Longman Limited, Essex, 1996, 590 p.

8. M. P. Allen, D. J. Tildesley. Computer simulation of liquids. Clarendon Press, Oxford, 1987, 387 p.
9. H. J. C. Berendsen. Simulating the Physical World: Hierarchical Modeling from Quantum Mechanics to Fluid Dynamics. Cambridge University Press, Cambridge, 2007, 624 p.
10. F. Jensen. Introduction to Computational Chemistry. Wiley, 2006, 624 p.

#### Допоміжна література

1. Szabo A., Ostlund N.L. Modern Quantum Chemistry. Macmillan. N.Y., 1985. 425 p.
2. Кларк Т. Компьютерная химия.– М.: Мир, 1990.– 283 с.
3. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Квантовая химия органических соединений. Механизмы реакций. М.Химия, 1986, 247 с.
4. Жидомиров Г.М., Багатурьянц А.А., Абронин И.А., Прикладная квантовая химия. М.Химия, 1979, 247 с. 295 с.
5. Степанов Н.Ф. Квантовая механика и квантовая химия. Изд-во Московского университета: М., 2001. 519 с.
6. Жоголев Д.А. Использование гауссовых функций в квантовохимических расчетах молекул. Физика молекул, 1975, вып. 1. с. 27–46
7. Шевченко С.М. Молекула в пространстве. Л.: Химия, 1986. 144 с.
8. Хобза П., Заградник Р. Межмолекулярные комплексы: Роль вандерваальсовых систем в физической химии и биодисциплинах. М.: Мир, 1989. 375 с.
9. Грибов Л.А. Полуэмпирика или ab initio – антагонизм или дополнительность? Журн. физ. химии, 2006, том 79, № 4, с. 688 – 692.
10. Чувылкин Н.Д., Смоленский Е.А., Зефилов Н.С. Квантовохимические методы построения волновых функций многоэлектронных систем, альтернативные приближению Хартри – Фока. Успехи химии, 2005, том 74, №11, 1118 – 1131.
11. Encyclopedia of Computational Chemistry. Vol. 1–5. (Eds P.v.Schleyer, N.L.Allinger, T.Clark, J.Gasteiger, P.A.Kollman, H.F. Schlaefel III, P.R.Schreiner). Willey, Chichester, 1998.
12. Young D.C. Computational Chemistry, Wiley Interscience, New York, 2001. 370 p.
13. А. М. Евсев, М. Я. Френкель, А. П. Шинкарев. Молекулярно-механическое моделирование в теории жидкостей. В кн.: Физика и физико-химия жидкостей. Вып. 1, Изд. МГУ.- 1972.- с. 125-150.
14. А. Н. Лагарьков, В. М. Сергеев. Метод молекулярной динамики в статистической физике // Успехи физ. наук, 1978, Т. 125, Вып. 3, с. 409-448.
15. Симкин Б. Я., Шейхт И. И. Квантовохимическая и статистическая теория растворов. Вычислительные методы и их применение. –М.: Химия, 1989.- 256 с.
16. Хеерман Д. В. Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике. –М.: Наука, 1990.- 176 с.
17. Х. Гулд, Я. Тобочник. Компьютерное моделирование в физике. –М.: Мир, 1990.- 351 с. (часть 1).
18. J. M. Haile. Molecular dynamics simulation. Elementary methods. John Wiley & Sons Inc., New York, 1992, 489 p.
19. V. Haberlandt, S. Fritzsche, G. Peinel, K. Heinzinger. Molekularodynamik. Grundlagen und Anwendungen. Friedr. Vieweg & Sohn Verlagsgesellschaft mbH, Wiesbaden, 1995, 252 S.
20. D. Frenkel, B. Smit. Understanding molecular simulation. Academic Press, San Diego, 1996, 443 p.
21. R.J. Sadus. Molecular simulation of fluids. Theory, algorithms and object-orientation. Elsevier, Amsterdam, 1999, 523 p.
22. Molecular Dynamics. From Classical to Quantum Methods. P.B. Balbuena, J.M. Seminario, Eds. In series: Theoretical and Computational Chemistry, Vol. 7. Elsevier, Amsterdam, 1999, 946 p.
23. Вода: структура, состояние, сольватация. Достижения последних лет / Ю.М. Кесслер, В.Е. Петренко, А.К. Лященко и др. Отв. Ред. А.М. Кутепов. – М.: Наука, 2003. – 404 с.



24. Molecular simulation and industrial application / Gubbins K. E., Quirke N., OPA, Amsterdam, 1996. XI, 550p.
25. D. A. Egelstaff. An introduction to the liquid state. –Clarendon Press, Oxford, 1992.- XV, 390 p.
26. A. Gavezzotti. Molecular Aggregation: Structure Analysis and Molecular Simulation of Crystals and Liquids. Oxford Science publication, 2006, 448 p.

#### **10. Посилання на інформаційні ресурси в Інтернеті, відео-лекції, інше методичне забезпечення**

1. Програмний комплекс GAMESS. Web ресурс:  
<http://www.msg.ameslab.gov/GAMESS/GAMESS.html>
2. Програма **Avogadro**: <http://avogadro.openmolecules.net/>
3. Програмний комплекс для МД-моделювання GROMACS. Web ресурс:  
<http://www.gromacs.org>