

Міністерство освіти і науки України

Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна

Кафедра хімічного матеріалознавства

“ЗАТВЕРДЖУЮ”

Проректор з науково-педагогічної
роботи

“ _____ ” _____ 2018_ р.

Робоча програма навчальної дисципліни

ПРИКЛАДНА КВАНТОВА ХІМІЯ

рівень вищої освіти магістр

галузь знань 10 Природничі науки

спеціальність 102 Хімія

освітня програма освітня-професійна програма “Хімія”

вид дисципліни за вибором

факультет хімічний

2018 / 2019 навчальний рік

Програму рекомендовано до затвердження вченою радою хімічного факультету

“ 31 ” серпня 2018 року, протокол № 7

РОЗРОБНИКИ ПРОГРАМИ:

Іванов В. В., д.х.н., професор кафедри хімічного матеріалознавства.

Програму схвалено на засіданні кафедри хімічного матеріалознавства

Протокол від “ 31 ” серпня 2018 року № 1

Завідувач кафедри хімічного матеріалознавства

_____ Коробов О.І.
(підпис) (прізвище та ініціали)

Програму погоджено методичною комісією хімічного факультету

Протокол від “31” серпня 2018 року № 1

Голова методичної комісії хімічного факультету

_____ Єфімов П.В.
(підпис) (прізвище та ініціали)

ВСТУП

Програма навчальної дисципліни “Прикладна квантова хімія” складена відповідно до освітньо-професійної (освітньо-наукової) програми підготовки магістра спеціальності: 102 – хімія.

1. Опис навчальної дисципліни

1.1. **Мета** викладання навчальної дисципліни – надати основи комп’ютерних розрахунків різноманітних характеристик молекулярних систем. Навчити практично застосувати доступні програмні пакети.

1.2. Основні завдання вивчення дисципліни «прикладна квантова хімія» полягають у

- наданні студенту певних знань щодо основних теоретичних концепцій сучасної хімічної науки
- ознайомленні студента з теоретичними основами сучасних квантово-хімічних методів
- наданні студенту вміння обирати той метод або групу методів, що здатна адекватно розв’язати поставлену задачу.
- розвитку практичних навиків щодо інтерпретації отриманих розрахункових даних та адекватного співставлення їх із доступними теоретичними та/чи експериментальними даними
- розвитку уміння роботи із доступними квантово-хімічними пакетами програм.

1.3. Кількість кредитів 8

1.4. Загальна кількість годин 240

| 1.5. Характеристика навчальної дисципліни | |
|---|-------------------------------------|
| За вибором | |
| Денна форма навчання | Заочна (дистанційна) форма навчання |
| Рік підготовки | |
| 1-й | 1-й |
| Семестр | |
| 1-й | 1-й |
| Лекції | |
| 32 год. | 10 год. |
| Практичні, семінарські заняття | |
| год. | год. |
| Лабораторні заняття | |
| 48 год. | 10 год. |
| Самостійна робота | |
| 160 год. | 220 год. |
| Індивідуальні завдання | |
| Не передбачено | |

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

знати: характеристики основних квантовохімічних методів, основні параметри електронної будови молекул.

вміти: обирати той метод, що здатен розв’язати поставлену задачу за допомогою певних (розповсюджених) квантово-хімічних програмних пакетів.

2. Тематичний план навчальної дисципліни

Розділ 1. Лекційний матеріал

Тема 1. Неемпіричні та напівемпіричні методи. Базиси неемпіричних методів. Уявлення про слейтеровські та гаусові базиси. Базиси Попла, Даннінговські базиси. Поляризаційні та дифузні добавки до стандартних базисів.

Тема 2. Обмежений метод Гартрі-Фока. Теоретичні основи, специфіка реалізацій, Збіжність ітераційної процедури. Методи прискорення ітераційної процедури. Метод DIIS.

Тема 3. Оптимізація геометрії. (аналітичні та чисельні алгоритми). Методи багатовимірної оптимізації, що використовуються у цій проблемі (метод найскорішого спуска, метод спряжених градієнтів, методи змінної метрики). Розрахунки гармонічних коливань.

Тема 4. Ефекти міжмолекулярної взаємодії. Проблема BSSE. Розрахунки перехідних станів хімічних перетворень. Коливання молекул. Візуалізація. ІЧ, КР спектри. Ангармонізм коливань. Енергії нульових коливань. Розрахунки теплоти утворення молекулярних систем.

Тема 5. Параметри електронного розподілу. Електронна густина на атомі (за Льовдіним та Маллікеном). Теорія Бадера.

Тема 6. Розрахунки систем із відкритою електронною оболонкою. Необмежений методи Хартрі-Фока. Проблема $\langle S^2 \rangle$.

Тема 7. Уявлення про електронну кореляцію. Динамічна та нединамічна кореляції електронів. Електронно збуджені конфігурації. Конфігураційні функції стану. Повна конфігураційна взаємодія. Методи урахування кореляційних енергій. Теорія збурень, метод конфігураційної взаємодії, теорія зв'язаних кластерів.

Тема 8. Розрахунки електронно-збуджених станів молекул.

Тема 9. Поляризаційно-континуальні моделі взаємодії з розчинником.

Розділ 2. Лабораторні заняття

Тема 10. Знайомство з квантово-хімічними пакетами. Базиси неемпіричних розрахунків. Пакет GAMESS. Розрахунки енергії та геометричної будови молекул. Візуалізація (Avogadro, ChemCraft).

Тема 11. Ефекти міжмолекулярної взаємодії. Розрахунки BSSE.

Тема 12. Молекулярні орбіталі. Розрахунки параметрів електронного розподілу за Льовдіним, Маллікеном, та Бадером.

Тема 13. Розрахунки перехідних станів хімічних перетворень.

Тема 14. Ефекти електронних кореляцій. Методи урахування електронної кореляції.

Тема 15. Електронно-збуджені стани молекул. Властивості. Розрахунки спектрів поглинання.

Тема 16. Моделі взаємодії молекули із середовищем.

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 |
| Розділ 1. Лекційний матеріал | | | | | | | | | | | | |
| Разом за розділом 1 | 112 | 32 | | | | 80 | 112 | 10 | | | | 102 |
| Розділ 2. Лабораторні заняття | | | | | | | | | | | | |
| Разом за розділом 2 | 128 | | 48 | | | 80 | 128 | | | 10 | | 118 |
| Усього годин | 240 | 32 | 48 | | | 160 | 240 | 10 | | 10 | | 220 |

4. Теми лабораторних занять

| № з/п | Назва теми | Кількість годин | |
|----------------|---|-----------------|-------|
| | | денне | з./в. |
| Тема 10 | Знайомство з квантово-хімічними пакетами. Базиси неемпіричних розрахунків. Пакет GAMESS. Розрахунки енергії та геометричної будови молекул. Візуалізація (Avogadro, ChemCraft). | 4 | 1 |
| Тема 11 | Ефекти міжмолекулярної взаємодії. Розрахунки BSSE. | 8 | 2 |
| Тема 12 | Молекулярні орбіталі. Розрахунки параметрів електронного розподілу за Льовдіним, Малікеном, та Бадером. | 4 | 1 |
| Тема 13 | Розрахунки перехідних станів хімічних перетворень. | 8 | 1 |
| Тема 14 | Ефекти електронних кореляцій. Методи урахування електронної кореляції. | 8 | 2 |
| Тема 15 | Електронно-збуджені стани молекул. Властивості. Розрахунки спектрів поглинання. | 8 | 2 |
| Тема 16 | Моделі взаємодії молекули із середовищем. | 8 | 1 |
| | Разом | 48 | 10 |

5. Самостійна робота

| Назва теми | Кількість годин, сам. роб. | |
|---|----------------------------|-------|
| | Денне | з. в. |
| Тема 1. Неемпіричні та напівемпіричні методи. Базиси неемпіричних методів. Уявлення про слейтеровські та гаусові базиси. Базиси Попла, Даннінговські базиси. Поляризаційні та дифузні добавки до стандартних базисів. | 10 | 20 |
| Тема 2. Обмежений метод Гартрі-Фока. Теоретичні основи, специфіка реалізацій, Збіжність ітераційної процедури. Методи прискорення ітераційної процедури. Метод DIIS. | 10 | 20 |
| Тема 3. Оптимізація геометрії. (аналітичні та чисельні алгоритми). Методи багатовимірної оптимізації, що використовуються у цій проблемі (метод найскорішого спуска, метод спряжених градієнтів, методи змінної метрики). Розрахунки гармонічних коливань. | 10 | 14 |
| Тема 4. Ефекти міжмолекулярної взаємодії. Проблема BSSE. Розрахунки перехідних станів хімічних перетворень. Коливання молекул. Візуалізація. ІЧ, КР спектри. Ангармонізм коливань. Енергії нульових коливань. Розрахунки теплоти утворення молекулярних систем. | 10 | 20 |
| Тема 5. Параметри електронного розподілу. Електронна густина на атомі (за Льовдіним та Маллікеном). Теорія Бадера. | 10 | 14 |
| Тема 6. Розрахунки систем із відкритою електронною оболонкою. Необмежений методи Хартрі-Фока. Проблема $\langle S^2 \rangle$. | 10 | 11 |
| Тема 7. Уявлення про електронну кореляцію. Динамічна та нединамічна кореляції електронів. Електронно збуджені конфігурації. Конфігураційні функції стану. Повна конфігураційна взаємодія. Методи урахування кореляційних енергій. Теорія збурень, метод конфігураційної взаємодії, | 10 | 20 |

| | | |
|---|-----|-----|
| теорія зв'язаних кластерів. | | |
| Тема 8. Розрахунки електронно-збуджених станів молекул. | 10 | 20 |
| Тема 9. Поляризаційно-континуальні моделі взаємодії з розчинником. | 10 | 10 |
| Тема 10. Знайомство з квантово-хімічними пакетами. Базиси неемпіричних розрахунків. Пакет GAMESS. Розрахунки енергії та геометричної будови молекул. Візуалізація (Avogadro, ChemCraft). | 10 | 11 |
| Тема 11. Ефекти міжмолекулярної взаємодії. Розрахунки BSSE. | 10 | 10 |
| Тема 12. Молекулярні орбіталі. Розрахунки параметрів електронного розподілу за Льовдіним, Малікеном, та Бадером. | 10 | 10 |
| Тема 13. Розрахунки перехідних станів хімічних перетворень. | 10 | 10 |
| Тема 14. Ефекти електронних кореляцій. Методи урахування електронної кореляції. | 10 | 10 |
| Тема 15. Електронно-збуджені стани молекул. Властивості. Розрахунки спектрів поглинання. | 10 | 10 |
| Тема 16. Моделі взаємодії молекули із середовищем. | 10 | 10 |
| Разом | 160 | 220 |

6. Індивідуальні завдання

Не передбачено

7. Методи контролю

Перевірка результатів лабораторних робіт (звітів). Для допуску до семестрового екзамену студенти мають виконати усі лабораторні роботи. Семестровий екзамен (письмова робота).

8. Схема нарахування балів

| Поточний контроль, самостійна робота, індивідуальні завдання | | | Екзамен | Сума |
|--|-----------|-------|---------|------|
| Розділ 1 | Розділ 2 | Разом | | |
| T1–T9 | T10 – T16 | | | |
| – | 60 | 60 | 40 | 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. Szabo A., Ostlund N.L. Modern Quantum Chemistry. Macmillan. N.Y., 1985. 425 p.
2. В. В. Иванов, Л. А. Слета. Квантовая химия. Харьков: "Фолио", 2007, 443 с.
3. Кларк Т. Компьютерная химия.– М.: Мир, 1990.–. 283 с.
4. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Квантовая химия органических соединений. Механизмы реакций. М.Химия, 1986, 247 с.

5. Жидомиров Г.М., Багатурьянц А.А., Абронин И.А., Прикладная квантовая химия. М.Химия, 1979, 247 с. 295 с.
6. Грибов Л.А., Муштакова С.П., Квантовая химия.– М.: Гардарика, 1999.
7. Степанов Н.Ф. Квантовая механика и квантовая химия. Изд-во Московского университета: М., 2001. 519 с.
8. Шевченко С.М. Молекула в пространстве. Л.: Химия, 1986. 144 с.
9. Хобза П., Заградник Р. Межмолекулярные комплексы: Роль вандерваальсовых систем в физической химии и биодисциплинах. М.: Мир, 1989. 375 с.
10. Грибов Л.А. Полуэмпирика или ab initio – антагонизм или дополнительность? Журн. физ. химии, 2006, том 79, № 4, с. 688 – 692.
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.

Допоміжна література

1. M. W. Schmidt, K. K. Baldridge, J. A. Boatz, S. T. Elbert, M. S. Gordon, J. H. Jensen, S. Koseki, N. Mastunada, K. A. Nguyen, S. Su, T. L. Windus, M. Dupuis, J. A. Montgomery // J. Comput. Chem. 1993. v. 14. – P. 1347-1363.
2. R. F. W. Bader, Atoms in Molecules. A quantum theory. Clarendon Press, Oxford, 1994. 438 p.
3. J. Tomasi, B. Mennucci, R. Cammi, Quantum Mechanical Continuum Solvation Models // Chem. Rev. – 2005. – v. 105. – P. 2999-3093.
4. W. Koch, M. C. Holthausen, A Chemist's Guide to Density Functional Theory. Wiley-VCH Verlag, 2001. – 293 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. Програма ChemCraft: <http://www.chemcraftprog.com/>
4. Програма AIMALL: <http://aim.tkgristmill.com/>