

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ
ИНСТИТУТ ХИМИИ ДАЛЬНЕВОСТОЧНОГО ОТДЕЛЕНИЯ
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК
(ИХ ДВО РАН)

УТВЕРЖДАЮ
Директор ИХ ДВО РАН

академик _____ В.И. Сергиенко

« ____ » _____ 2015 г.

ПРОГРАММА КУРСА

ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ РАСЧЕТА АТОМНО-МОЛЕКУЛЯРНЫХ СИСТЕМ

Для аспирантов, проходящих обучение по направлению подготовки
04.06.01 - Химические науки

Направленность (профиль) подготовки 02.00.04 физическая

Квалификация (степень) выпускника: **Исследователь. Преподаватель-исследователь**

Форма обучения **очная**

Владивосток 2015 г.

1. Цели и задачи курса

Программа курса “Теоретические методы расчета атомно-молекулярных систем” составлена в соответствии с требованиями государственного образовательного стандарта высшего и профессионального образования.

Цель курса - сформировать представление о современных теоретических методах расчета атомно-молекулярных систем в плане исследования их электронного строения и физико-химических свойств; о физико-математических основах данных методов, о сопоставлении расчетных и экспериментальных данных, о критериях оценки качества и достоверности расчетов.

Преподавание данного курса тесно связано с другими курсами государственного образовательного стандарта 04.06.01 - Химические науки.

2. Требования к уровню усвоения содержания курса

По завершению обучения аспирант должен:

- обладать знаниями о физико-математических основах, на которые опираются расчетные методы;
- знать об основных приближениях, используемых при решении уравнения Шредингера;
- иметь представления об особенностях получаемых данных и их связи с экспериментально определяемыми электронными характеристиками вещества и его физико-химическими свойствами
- уметь проводить квантово-химические расчеты различных систем и процессов оптимальными методами и с необходимой точностью, интерпретировать результаты расчетов.

3. Объем дисциплины и виды учебной работы

Изучение дисциплины «Теоретические методы расчета атомно-молекулярных систем» аспирантами построено на базе лекций.

Курс лекций включает в себя девять основных тематических разделов.

4. Система контроля знаний студента

Для контроля усвоения дисциплины учебным планом предусмотрен экзамен.

Вопросы к экзамену:

1. Уравнение Шредингера и подходы к его решению.
2. Приближение МО ЛКАО.
3. Приближение Борна-Оппенгеймера.
4. Методы Хартри-Фока, Хартри-Фока-Рутана.
5. Конфигурационное взаимодействие, теория возмущений.
6. Приближения ППДП, ППДП/2.
7. Приближение ЧПДП.
8. Приближение МЧПДП/3.
9. Приближения МПДП, АМ1, РМ3.
10. Метод ССП-Х α -РВ.
11. Метод Х α -ДВ.
12. Методы молекулярной динамики.
13. Экспериментальный подбор параметров для полуэмпирических методов.

14. Характеристики атомно-молекулярных, рассчитываемые квантово-механическими методами

5. Содержание дисциплины.

5.1. Новизна курса. Основа курса – современные представления о теоретических и практических аспектах классических и современных квантово-химических методов, используемых для теоретического описания различных характеристик многоатомных систем и процессов с их участием. В лекционный курс постоянно включается информация о новейших достижениях науки. Содержание курса аналогично курсам, читаемым в ДВФУ и ведущих зарубежных университетах.

5.2. Тематический план курса (распределение часов)

| Наименование разделов | Количество часов | | | Всего часов |
|---|------------------|---------------------|------------------------|-------------|
| | Лекции | Практика (семинары) | Самостоятельная работа | |
| Нестационарное и стационарное уравнения Шредингера, приближение Борна-Оппенгеймера | 2 | 2 | 4 | 8 |
| Неэмпирические методы расчета, уравнения Хартри-Фока, Хартри-Фока-Рутана | 2 | 2 | 4 | 8 |
| Конфигурационное взаимодействие, теория возмущений, подход Меллера-Плессета | 2 | 2 | 4 | 8 |
| Особенности приграмм, в которых реализованы неэмпирические методы, GAUSSIAN, HONDO, GAMES | 2 | 2 | 4 | 8 |
| Полуэмпирические методы, ППДП, ЧПДП, МЧПДП/3, МПДП | 2 | 2 | 4 | 8 |
| Методы функционала плотности, Х α -ДВ, ССП-Х α -РВ | 2 | 2 | 4 | 8 |
| Методы молекулярной динамики | 2 | 2 | 4 | 8 |
| Сопоставление расчетных и экспериментальных данных, | 2 | 2 | 4 | 8 |

| | | | | |
|--|-----------|-----------|-----------|-----------|
| критерии достоверности расчетов | | | | |
| Примеры практического применения расчетных методов в химической физике | 2 | 2 | 4 | 8 |
| Итого по курсу: 72 ч | 18 | 18 | 36 | 72 |

5.3. Содержание разделов

Содержание разделов кратко отражено в их заглавиях.

ОСНОВНАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Цирельсон В.Г., Бобров М.Ф. Квантовая химия атома. М: РХТУ, 1999.-51с.
2. В.И. Минкин, Б.Я. Симкин, Р.М. Миняев. Теория строения молекул. Ростов-на-Дону: “Феникс”, 1997 – 560 с.
3. Полуэмпирические методы расчета электронной структуры / Под ред. Дж. Сигала. – М.: Мир, 1980.
4. С. Фудзинага. Метод молекулярных орбиталей. - М.: Мир, 1983.
5. Т. Кларк. Компьютерная химия. - М.: Мир, 1990.
6. Квантовохимические методы расчета молекул / Под ред. Ю.А. Устынюка. – М.: Химия, 1980.
7. Апостолова Е.С., Михайлюк А.И., Цирельсон В.Г. Квантово-химическое описание реакций. М: РХТУ, 1999.- 61с.

Программу разработал
д.ф.-м.н., профессор

А.Ю. Устинов.

