

АННОТАЦИЯ РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ ДИСЦИПЛИНЫ

Б1.В.09 «Квантово-химическое моделирование наноструктур»

по направлению подготовки: 28.03.02 «Наноинженерия»

по профилю: Органические и неорганические наноматериалы

Квалификация выпускника: БАКАЛАВР

Выпускающая кафедра: ПНТБМ

Кафедра-разработчик рабочей программы: неорганической химии

1. Цели освоения дисциплины:

Целями освоения дисциплины «Квантово-химическое моделирование наноструктур» в соответствии с общими целями основной профессиональной образовательной программы послевузовского профессионального образования (аспирантура) (далее - образовательная программа послевузовского профессионального образования) являются:

- а) знание основных постулатах и математическом аппарате квантовой механики;
- б) представление о приближенных методах решения квантово-механических задач;
- в) представления об основных положениях квантовой химии;
- г) знание о неэмпирических и полуэмпирических методах изучения электронного строения атомов и молекул, применение получаемых данных для решения научных и прикладных задач;
- д) знание и применение для решения научных и прикладных задач.

2. Содержание дисциплины:

Тема 1. Теория электронного строения молекул. Метод молекулярных орбиталей (МО ЛКАО). Минимизация энергии системы. Метод самосогласованного поля Хартри-Фока-Рутаана. Энергия корреляции.

Тема 2. Аналитические аппроксимации атомных орбиталей и атомные базисные наборы. Минимальный базисный набор. Расширенные базисы. Атомные псевдопотенциалы. Учет электронной корреляции.

Тема 3. Методы функционала плотности. Методы, основанные на приближении локальной плотности. Методы, основанные на обобщенном градиентном приближении. Гибридные методы. Полуэмпирические методы. Общие положения. Приближение нулевого дифференциального перекрывания.

Тема 4. Наиболее распространенные полуэмпирические методы. Метод CNDO и параметризация CNDO/2. Метод INDO и параметризация MINDO/3. Приближение NDDO. Метод MNDO. Метод AM1. Метод PM3. Основы методов. Достоинства, недостатки, сопоставление погрешностей расчета этими методами.

Тема 5. Поверхность потенциальной энергии. Определение ППЭ. ППЭ двухатомной молекулы. ППЭ многоатомной молекулы. Стационарные точки. Матрица Гесса. Оптимизация равновесной геометрии молекулы. ППЭ и химическая реакция.

Тема 6. Учет сольватации в квантовохимических расчетах. Классификация моделей. Сольватонная модель. Модель самосогласованного поля реакции. Приближение супермолекулы. Метод атом-атомных потенциалов.

3. В результате освоения обучающийся должен:

1) Знать:

- а) методы решения квантово-химических задач;
- б) неэмпирические и полуэмпирические методы изучения электронного строения атомов и молекул.

2) Уметь:

- а) оценивать и анализировать электронное строение атомов и молекул;
- б) осуществлять неэмпирические и полуэмпирические расчеты электронного строения атомов и молекул, интерпретировать полученные результаты.

3) Владеть:

- а) неэмпирическими и полуэмпирическими методами расчетов;
- б) методами оценки реакционной способности.

Зав.каф. ПНТБМ



Вознесенский Э.Ф.