

КОНСПЕКТ

по *Квантовохимично моделиране*

за магистърската програма “Компютърна химия” (30)

I. Вариационно и пертурбационно разглеждане на прости системи

2 часа

1. Вариационен принцип. Приложение на вариационния принцип при моделиране на H_2^+ .
2. Пертурбационна теория на молекулните орбитали при спрегнати системи.

II. Квантовохимични методи

3 часа

1. Квантовохимични методи – емпирични, полумемпирични, немемпирични.
2. Емпирични методи. Метод на Хюкел – приложение към карбоверижни спрегнати системи.
3. Полумемпирични методи. Програма MOPAC – входен файл и основни команди.
4. Немемпирични методи. Структура на входните файлове за програмата GAUSSIAN. Някои основни команди.

III. Повърхнини на потенциална енергия в основно и възбудено състояние

2 часа

1. Критични точки. Изчисляване на кинетични параметри и термодинамични функции на реакции.
2. Сканиране на повърхност на потенциална енергия на основно състояние с програмата GAUSSIAN – структура на входния файл.
3. Визуализиране на резултатите от изчисленията. Софтуер за визуализация.
4. Изследване на реакционен път - оптимизация на реактанта, продукта и преходното състояние.

IV. Фотохимични реакции

3 часа

1. Първични и вторични фотохимични реакции. Основни закони на фотохимията. Кинетика на фотохимичните реакции.
2. Електронни преходи в молекулите. Методи, базирани на активно пространство – CASSCF, CASPT2. Конфигурационни функции.
3. Изчисляване на вертикални и адиабатни енергии на възбуждане и емисионните енергии. Конично сечение – оптимизация, подбор на активно пространство.
4. Входни файлове за програмите MOLPRO и TURBOMOLE. Визуализираща програма MOLDEN.

Общ брой часове:

10

ЛИТЕРАТУРА

1. В. Делчев, Квантовохимични методи, ПУ, 2010
2. Н. Тютюлков, Квантова химия, Наука и изкуство, 1978
3. Н. Тютюлков, Теория на молекулните орбити, Наука и изкуство, 1970
4. Дж. Маррел, С. Кетгл, Дж. Теддер, Теория валентности, Мир, 1968
5. С. Dykstra, Ab initio calculations of the structures and properties of molecules, Elsevier, 1988