

Квантова хімія.

Вибіркова

Квантова хімія служить основою теоретичних уявлень сучасної хімії як при описі будови хімічних сполук, так і при поясненні поведінки цих сполук у хімічних реакціях і при дії на них зовнішніх полів. В свою чергу квантова хімія використовує як фундамент квантову механіку - механіку мікрочастинок: електронів, протонів, нейтронів, атомів, молекул, яка враховує хвильові властивості мікрочастинок. Окрім того, квантова хімія використовує класичну теорію будови речовини і велике число експериментальних даних, що існують в хімії і одержані узагальненням експериментального матеріалу.

Вивчення квантової хімії дає можливість отримати уявлення про різні властивості і явища такі як спектри (оптичні, електронний парамагнітний резонанс, ядерний магнітний резонанс), магнітна і електрична характеристика речовин, реакційна здатність молекул, протікання хімічних реакцій і каталіз.

Мета: Сформувати уявлення про теоретичні методи, якими вивчають електронну будову атомів та молекул. Надати основи комп'ютерних розрахунків різноманітних характеристик молекулярних систем. Навчити практично застосувати доступні програмні пакети.

У результаті вивчення даного курсу студент повинен

знати: основні положення квантової теорії, основні параметри електронної будови молекул, модельні квантовомеханічні задачі, наближені методи розв'язання рівняння Шредінгера, метод молекулярних орбіталей, метод валентних схем, характеристики основних квантовохімічних методів.

вміти: обирати придатні квантово-хімічні методи для розв'язання задач, інтерпретувати та використовувати результати квантово-хімічних розрахунків..

Базова

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.Schreinere). Willey, Chichester, 1998.
12. Young D.C. Computational Chemistry, Wiley Interscience, New York, 2001. 370 p.