

БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

УТВЕРЖДАЮ

Ректор Белорусского
государственного университета

А.Д.Король

27 июня 2025 г.

Регистрационный №УД- 13990/уч.



ПРИКЛАДНАЯ КВАНТОВАЯ ХИМИЯ

Учебная программа учреждения образования по учебной дисциплине для
специальности:

1-31 05 04 Фундаментальная химия

2025 г.

Учебная программа составлена на основе ОСВО 1-31 05 04 -2021, учебного плана G31-1-237/уч. от 22.03.2022.

СОСТАВИТЕЛИ:

Вадим Э. Матулис, доцент кафедры неорганической химии химического факультета Белорусского государственного университета, кандидат химических наук;

Виталий Э. Матулис, доцент кафедры неорганической химии химического факультета Белорусского государственного университета, кандидат химических наук.

РЕЦЕНЗЕНТ:

Ю.В.Григорьев, заведующий лабораторией химии конденсированных сред Учреждения БГУ «Научно-исследовательский институт физико-химических проблем», кандидат химических наук

РЕКОМЕНДОВАНА К УТВЕРЖДЕНИЮ:

Кафедрой неорганической химии БГУ
(протокол № 10 от 06.06.2025);

Научно-методическим советом БГУ
(протокол № 11 от 26.06.2025)

Заведующий кафедрой



Д.В.Свиридов

Ковальчук-Рабинская
Ю.В.

БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

УТВЕРЖДАЮ

Ректор Белорусского
государственного университета

_____ А.Д.Король

27 июня 2025 г.

Регистрационный №УД- 13990/уч.

ПРИКЛАДНАЯ КВАНТОВАЯ ХИМИЯ

Учебная программа учреждения образования по учебной дисциплине для
специальности:

1-31 05 04 Фундаментальная химия

2025 г.

Учебная программа составлена на основе ОСВО 1-31 05 04 -2021, учебного плана G31-1-237/уч. от 22.03.2022.

СОСТАВИТЕЛИ:

Вадим Э. Матулис, доцент кафедры неорганической химии химического факультета Белорусского государственного университета, кандидат химических наук;

Виталий Э. Матулис, доцент кафедры неорганической химии химического факультета Белорусского государственного университета, кандидат химических наук.

РЕЦЕНЗЕНТ:

Ю.В. Григорьев, заведующий лабораторией химии конденсированных сред Учреждения БГУ «Научно-исследовательский институт физико-химических проблем», кандидат химических наук

РЕКОМЕНДОВАНА К УТВЕРЖДЕНИЮ:

Кафедрой неорганической химии БГУ
(протокол № 10 от 06.06.2025);

Научно-методическим советом БГУ
(протокол № 11 от 26.06.2025)

Заведующий кафедрой

Д.В.Свиридов

ПОЯСНИТЕЛЬНАЯ ЗАПИСКА

Цели и задачи учебной дисциплины

Цель учебной дисциплины – ознакомить студентов с методами квантово-химических расчетов молекулярных систем и наиболее широко используемыми программными пакетами для проведения таких расчетов.

Задачи учебной дисциплины:

1. познакомить студентов с современными методами квантово-химических расчетов молекулярных систем (полуэмпирических, *ab initio* и DFT);
2. научить студентов выполнять основные виды квантовохимических расчетов молекулярных систем с использованием программных пакетов для квантово-химических расчетов (оптимизация геометрии молекул, расчет полной энергии, зарядов на атомах, термодинамических функций).

Место учебной дисциплины в системе подготовки специалиста с высшим образованием.

Учебная дисциплина относится к модулю «Современные направления химической науки» компонента учреждения высшего образования.

Дисциплина может быть прочитана после изучения таких общих дисциплин, как «Неорганическая химия», «Органическая химия», «Физическая химия», «Квантовая химия».

Требования к компетенциям

Освоение учебной дисциплины «Прикладная квантовая химия» должно обеспечить формирование следующих специализированных компетенций:

Разбираться в современных направлениях аналитической химии, физической химии, электрохимии, химии полимеров, анализировать новейшие методы, основанные на применении достижений компьютерного моделирования, микрочиповых и нанотехнологий, физико-химического моделирования, переходы к конструированию сложных макромолекулярных и надмолекулярных структур.

В результате освоения учебной дисциплины студент должен:

знать:

- типы стационарных точек на поверхности потенциальной энергии и способы их идентификации;
- базисные наборы гауссовского типа;
- методы квантово-химических расчетов молекулярных систем (полуэмпирические, *ab initio*, DFT);
- методы расчета зарядов на атомах и термодинамических функций.

уметь:

- выполнять поиск стационарных точек на поверхности потенциальной энергии и определять их тип;
- выполнять основные виды квантово-химических расчетов (расчеты полной энергии молекул, зарядов на атомах, термодинамических функций);

владеть:

- методологией основных видов квантово-химических расчетов молекулярных систем;

наиболее широко используемыми программными пакетами для проведения квантово-химических расчетов молекулярных систем.

Структура учебной дисциплины

Дисциплина изучается в 8 семестре. В соответствии с учебным планом всего на изучение учебной дисциплины «Прикладная квантовая химия» отведено для **очной формы** получения высшего образования – 102 часа, в том числе 50 аудиторных часов: лекции – 40 часов, семинарские занятия – 10 часов.

Из них:

Лекции – 34 часа + 6 часов ДОТ, семинарские занятия – 6 часов ДОТ, управляемая самостоятельная работа – 4 часа ДОТ.

Трудоемкость учебной дисциплины составляет 3 зачетные единицы.

Форма промежуточной аттестации – зачет.

СОДЕРЖАНИЕ УЧЕБНОГО МАТЕРИАЛА

Тема 1. Стационарные точки на поверхности потенциальной энергии

Поверхность потенциальной энергии (ППЭ) двухатомной молекулы. Равновесное межъядерное расстояние. Энергия нулевых колебаний (ZPVE). Энергия связи. Оптимизация геометрии. ППЭ многоатомных молекул. Точки минимума и седловые точки. Частоты нормальных колебаний. Идентификация стационарной точки. Сечения ППЭ. Координата реакции.

Тема 2. Полная энергия молекулы

Оператор Гамильтона. Уравнение Шредингера для молекулярных систем. Разделение электронного и ядерного движений. Адиабатическое приближение. Полная энергия молекулы. Энергия молекулы при 0 К.

Тема 3. Метод МО ЛКАО

Метод Хартри-Фока. Приближение линейной комбинации атомных орбиталей (ЛКАО). Базисные функции и базисные наборы. Стандартные базисные наборы гауссовских функций.

Тема 4. Уравнения Рутаана

Уравнения Рутаана. Числа одно- и двухэлектронных интегралов в зависимости от размера молекулы базисного набора. Характеристика базисных наборов (STO-NG, K-LMG, базисные наборы с поляризационными и диффузными функциями).

Тема 5. Волновая функция молекулы. Электронная корреляция

Волновая функция молекулы. Ограниченный (RHF) и неограниченный (UHF) методы Хартри-Фока. Методы учета электронной корреляции. Метод конфигурационного взаимодействия (CISD, CISDT, CISDTQ и full CI) и многоконфигурационного ССП (MCSCF). Теория возмущений Меллера-Плессета (MP2, MP3, MP4).

Тема 6. Полуэмпирические методы. DFT

Полуэмпирические методы. Полное пренебрежение дифференциальным перекрыванием. Характеристика полуэмпирических методов. Теория функционала плотности (DFT). Local Density Approximation (LDA), градиентно-скорректированные функционалы и гибридные функционалы.

Тема 7. Квантово-химические расчеты молекулярных систем

Расчеты зарядов на атомах в молекуле. Расчеты молекулярных электростатических потенциалов. Расчеты энергий молекулярных орбиталей. Индексы реакционной способности. Исследование процессов протонирования молекул и взаимодействия с электрофильными и нуклеофильными реагентами. Расчеты колебательных спектров молекул. Исследование таутомерных превращений.

Тема 8. Расчеты термодинамических характеристик веществ и химических реакций с использованием полуэмпирических и неэмпирических методов

Расчеты термодинамических функций веществ и химических реакций при различных температурах и давлениях. Расчеты энтальпий образования веществ в рамках метода изодесмических реакций. Расчеты кинетических параметров химических реакций. Методы локализации седловых точек на ППЭ (метод внутренней координаты, оптимизация геометрии к седловой точке).

УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКАЯ КАРТА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Очная (дневная) форма получения высшего образования с применением дистанционных образовательных технологий
(ДОТ)

Номер раздела, темы	Название раздела, темы	Количество аудиторных часов					Количество часов УСР	Форма контроля
		Лекции	Практические занятия	Семинарские занятия	Лабораторные занятия	Иное		
1	2	3	4	5	6	7	8	9
1	Стационарные точки на поверхности потенциальной энергии	6		2 (ДОТ)				тест, отчет (СДО)
2	Полная энергия молекулы	2						опрос
3	Метод МО ЛКАО	8		2 (ДОТ)				тест, отчет (СДО)
4	Уравнения Рутаана	2						опрос
5	Волновая функция молекулы. Электронная корреляция	2						опрос
6	Полуэмпирические методы. DFT	2					2 (ДОТ)	отчет (СДО), контрольная работа
7	Квантово-химические расчеты молекулярных систем	2 + 2 (ДОТ)		2 (ДОТ)				отчет (СДО)

8	Расчеты термодинамических характеристик веществ и химических реакций с использованием полуэмпирических и неэмпирических методов	10 + 4 (ДОТ)					2 (ДОТ)	отчет (СДО), контрольная работа
---	---	-----------------	--	--	--	--	------------	------------------------------------

ИНФОРМАЦИОННО-МЕТОДИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ

Основная литература

1. Цирельсон, В. Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела : учебное пособие для вузов : учебное пособие / В. Г. Цирельсон. — 5-е изд. — Москва : Лаборатория знаний, 2021. — 522 с.
2. Диченко, Я. В. Компьютерное моделирование строения и реакционной способности молекул / Я. В. Диченко. - Минск : Беларуская навука, 2023. - 137 с.

Дополнительная литература

1. Матулис, В. Э. Прикладная квантовая химия : учеб. пособие для студ. хим. и физ. спец. учрежд., обеспеч. получение высшего образования / Вадим Э. Матулис, Виталий Э. Матулис, О. А. Ивашкевич. - Минск : БГУ, 2007. - 144 с.
2. Кларк Т. Компьютерная химия. – М.: Мир, 1990.
3. Jensen F. Introduction to Computational Chemistry. J. Wiley & Sons, 1999.
4. Foresman J.B., Frisch A. Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods. Gaussian; 3rd edition, 2015.
5. Alcamí M., Mó O., Yáñez M. A Molecular Orbital Study of Azole-Li⁺ Complexes // J. Phys. Chem. - 1989. - Vol. 93. - P. 3929-3936.
6. Chen Z.X., Xiao J.M., Chiu Y.N. Studies on Heats of Formation for Tetrazole Derivatives with Density Functional Theory B3LYP Method // J. Phys. Chem. A. – 1999. – Vol. 103, N 40. – P. 8062-8066.
7. Wong M.W., Frisch M.J., Wiberg K.B. Solvent Effects. 1. The Mediation of Electrostatic Effects by Solvent // J. Am. Chem. Soc. – 1991. – Vol. 113. – P. 4776-4782.
8. Theoretical study of gas-phase formation enthalpies and isomerism for 4(5)-nitro-1,2,3-triazole and its N-alkyl derivatives and experimental determination of formation enthalpy for 2-methyl-4-nitro-1,2,3-triazole / Vadim E. Matulis, O. A. Ivashkevich, P. N. Gaponik, P. D. Elkind, G. T. Sukhanov, A. B. Bazyleva, Dz. H. Zaitsau // J. Mol. Struct. (Theochem). – 2008. – Vol. 854. – P. 18-25.
9. CH acidity of five-membered nitrogen-containing heterocycles: DFT investigation / Vadim E. Matulis, Y. S. Halauko, O. A. Ivashkevich, P. N. Gaponik [et al.] // J. Mol. Struct. (Theochem). – 2009. – Vol. 909. – P. 19-24.
10. Substituent-dependent coordination modes of 1-methyl-5-R-tetrazoles in their cupric chloride complexes / S. V. Voitekhovich, A. S. Lyakhov, V. E. Matulis, L. S. Ivashkevich, O. A. Ivashkevich // Polyhedron. – 2019. – Vol. 162. – P. 100–110.
11. Mesoionic tetrazolium-5-aminides: Synthesis, Molecular and Crystal Structures, UV-Vis Spectra, and DFT Calculations / V. A. Budevich, S. V. Voitekhovich, A. V. Zuraev, Vadim E. Matulis, Vitaly E. Matulis, A. S. Lyakhov, L. S. Ivashkevich, O. A. Ivashkevich // Beilstein J. Org. Chem. – 2021. – Vol. 17. – P. 385-395.

12. Comparative DFT Study of Small Anionic Silver and Copper Clusters: Evolution of Structure and Physicochemical Properties / Vitaly E. Matulis, O. A. Ivashkevich, D. D. Lappo, D. A. Lyakhov, D. Michels // J. Phys. Chem. C. – 2023. – Vol. 127. – N. 38. – P. 18997–19016.

13. Computationally Effective Approach for Studies of Mechanism and Thermodynamics of Heterogeneous Catalytic Processes on Metal Oxides / E. G. Ragoyja, V. E. Matulis, O. A. Ivashkevich, D. A. Lyakhov, D. Michels // Int. J. Quant. Chem. – 2024. – Vol. 124. – N. 17 – P. e27470.

Перечень рекомендуемых средств диагностики и методика формирования итоговой отметки

Формой промежуточной аттестации по дисциплине «Прикладная квантовая химия» учебным планом предусмотрен зачет.

Для текущей оценки достижений и контроля качества усвоения знаний студентами используется следующий диагностический инструментарий:

- выполнение тестовых заданий;
- выполнение заданий с составлением отчета на СДО;
- письменные контрольные работы по отдельным темам.

Примерный перечень заданий для управляемой самостоятельной работы

Тема 6. Полуэмпирические методы. DFT (2 ч ДОТ)

Проблема выбора метода расчета (базисный набор, учет электронной корреляции).

Выполнить расчет энергий гомолитического разрыва связей различными методами.

(Форма контроля – отчет (СДО), контрольная работа).

Тема 8. Расчеты термодинамических характеристик веществ и химических реакций с использованием полуэмпирических и неэмпирических методов (2 ч ДОТ)

Расчеты энтальпий образования веществ в рамках метода изодесмических реакций.

Выполнить расчет энтальпии образования вещества.

(Форма контроля – отчет (СДО), контрольная работа).

Примерная тематика семинарских занятий

1. Использование программы Gaussian для оптимизации геометрии двухатомных и многоатомных молекул.

2. Исследование влияния базисного набора на результаты расчетов геометрических характеристик молекул и термодинамических и кинетических параметров химических реакций.

3. Расчеты зарядов на атомах. Графическое представление молекулярных орбиталей.

Описание инновационных подходов и методов к преподаванию учебной дисциплины

При организации образовательного процесса используются *эвристический и практико-ориентированный подходы*, которые предполагают:

- демонстрацию многообразия решений профессиональных задач;
- индивидуализацию обучения через возможность самостоятельно ставить цели, осуществлять рефлекссию собственной образовательной деятельности;
- освоение содержания образования через решения практических задач.

Методические рекомендации по организации самостоятельной работы

При изучении учебной дисциплины рекомендуется использовать следующие формы самостоятельной работы:

- поиск и обзор литературы и электронных источников по заданной проблеме курса;
- выполнение домашнего задания;
- решение задач, предлагаемых на практических занятиях;
- подготовка к практическим семинарским занятиям;
- научно-исследовательские работы;
- составление моделей и проведение расчетов.

Примерный перечень вопросов к зачету

1. Поверхность потенциальной энергии двухатомных молекул.
2. Энергия диссоциации двухатомной молекулы на атомы и на ионы.
3. Расчеты энергии диссоциации двухатомной молекулы в программе Gaussian.
4. Поверхность потенциальной энергии многоатомных молекул. Стационарные точки на ППЭ.
5. Типы стационарных точек на ППЭ. Устойчивые структуры и переходные состояния.
6. Локализация стационарных точек на ППЭ. Определение типа стационарной точки.
7. ППЭ для внутреннего вращения в молекулах. Барьер внутреннего вращения.
8. Расчеты барьера внутреннего вращения молекул в программе Gaussian.
9. Расчеты барьера инверсии аммиака в программе Gaussian. Влияние базисного набора.
10. ППЭ простейших бимолекулярных реакций.
11. Расчеты энергии активации простейших бимолекулярных реакций в программе Gaussian.
12. Уравнение Шрёдингера для молекул. Приближение Борна – Оппенгеймера.

13. Метод Хартри-Фока для молекул. Молекулярные орбитали. Приближение линейной комбинации атомных орбиталей (ЛКАО). АО Слэтера
14. Качественная теория МО двухатомных молекул. Связывающие и разрыхляющие орбитали.
15. Базисные наборы STO-NG
16. Базисные наборы K-LMG
17. Базисные наборы с поляризационными и диффузными функциям.
18. Характеристика некоторых базисных наборов. Проблема выбора базисного набора.
19. Уравнения Рутаана.
20. Волновая функция молекулы. Ограниченный (RHF) и неограниченный (UHF) методы Хартри-Фока.
21. Метод конфигурационного взаимодействия (CISD, CISDT, CISDTQ и full CI) и многоконфигурационного ССП (MCSCF). Теория возмущений Меллера-Плессета (MP2, MP3, MP4).
22. Полуэмпирические методы. Полное пренебрежение дифференциальным перекрыванием.
23. Теория функционала плотности (DFT).
24. Заряды на атомах в молекуле.
25. Молекулярные электростатические потенциалы.
26. Энергии молекулярных орбиталей и реакционная способность.
27. Расчеты колебательных спектров молекул в программе Gaussian. Отнесение сигналов в спектрах.
28. Расчеты зарядов на атомах в программе Gaussian.
29. Расчеты энергий молекулярных орбиталей в программе Gaussian. Энергии ВЗМО и НСМО и реакционная способность.
30. Расчеты молекулярных электростатических потенциалов в программе Gaussian. Построение контурных карт молекулярного электростатического потенциала.
31. Исследование таутомерных превращений.
32. Принципы расчета термодинамических характеристик веществ.
33. Расчеты энтальпии образования вещества.
34. Расчеты термодинамических функций веществ в программе Gaussian.
35. Расчеты энтальпии образования вещества в программе Gaussian методом изодесмических реакций.
36. Расчеты энтальпии образования вещества в программе Gaussian по реакции атомизации.
37. Исследование процессов протонирования молекул. Основность в газовой фазе.
38. Определение возможных направлений протонирования молекулы по зарядам на атомах и контурным картам молекулярного электростатического потенциала.
39. Определение возможных направлений протонирования молекулы путем расчета энергий протонирования различных атомов.
40. Расчет газофазной основности в программе Gaussian.

ПРОТОКОЛ СОГЛАСОВАНИЯ УЧЕБНОЙ ПРОГРАММЫ УО

Название учебной дисциплины, с которой требуется согласование	Название кафедры	Предложения об изменениях в содержании учебной программы учреждения высшего образования по учебной дисциплине	Решение, принятое кафедрой, разработавшей учебную программу (с указанием даты и номера протокола)
Учебная дисциплина не требует согласования			

Заведующий кафедрой неорганической химии
 член-корреспондент НАН Беларуси
 доктор химических наук, профессор

_____ Д.В.Свиридов

06.06.2025

ДОПОЛНЕНИЯ И ИЗМЕНЕНИЯ К УЧЕБНОЙ ПРОГРАММЕ УО

на ____ / ____ учебный год

№ п/п	Дополнения и изменения	Основание

Учебная программа пересмотрена и одобрена на заседании кафедры
_____ (протокол № ____ от _____ 202_ г.)

Заведующий кафедрой

УТВЕРЖДАЮ
Декан факультета
