



ЦЕНТЪР ЗА ОБУЧЕНИЕ – БАН

1000 София
ул. „Сердика“ № 4
<http://edu.bas.bg>

email: tdc-phd@cu.bas.bg
тел.: 02 987 31 67
02 979 52 60

Основна информация:

Име на курса: **Квантовохимични методи в катализа**

Лектор: доц. д-р Валентин Алексиев

Телефон: +359 979 2549

Имейл: valexiev@ic.bas.bg.

Хорариум: 30 учебни часа

Анотация:

Задачата на курса е да запознае докторантите със съвременните квантовохимични методи като: метод на Хартри-Фок, теория на функционала на плътността, корелационни методи, хибридни методи като молекулярна механика и метод на силната връзка. Указаните методи ще бъдат демонстрирани върху някои прости молекулярни системи и повърхности. Докторантите ще проведат практически занятия с квантово-химичните програми Демон, Гаусиан-03 и Кристал-03.

Тематично съдържание на курса (кратко описание по теми или модули):

Тема / Модул 1: Въведение в изчислителната химия. Модели, приближения и реалност.

Основни принципи - енергия, електростатика, термодинамика, квантова механика, статистическа механика и атомни единици.

Практическа сесия 1: Виртуална машина за този курс. Инсталирани програмни пакети и интерфейси. Работа с графичен интерфейс Gabedit.

Тема / Модул 2: Методи за молекулярно моделиране I. Модели за молекулярна геометрия.

- Декартови координати и вътрешни координати.
- Описание и моделиране на молекулярна геометрия.

Методи за пресмятане на електронна структура на молекулярни системи. Хартри-Фок и post-ХФ.

Тема / Модул 3: Методи за молекулярно моделиране II. Теория на Функционала на Плътността(ТФП).

- Теорема на Кон-Шам. ТФП.
- Обмено-корелационни функционали (LDA, GGA, хибридни функционали).
- Повърхности на потенциалната енергия – ППЕ(PES)
- ППЕ топология
- Първи и втори производни на енергията
- Оптимизация на геометрията: Молекули и клъстер

Тема / Модул 4: Методи за молекулярно моделиране III. Вибрация на молекулярните системи

- Матрица на Хес и вибрационен режим
- Вибрация на молекули и клъстери
- ЯМР и ИЧ / Раманов спектър(спектър на комбинационно разсейване).



ЦЕНТЪР ЗА ОБУЧЕНИЕ – БАН

1000 София
ул. „Сердика“ № 4
<http://edu.bas.bg>

email: tdc-phd@cu.bas.bg
тел.: 02 987 31 67
02 979 52 60

Упражнение: Практическа сесия 4: Приложения за бензол молекула и кльстери.
Изчисляване на ИЧ спектър и ЯМР спектър на бензол в приближението на Хартри-Фок.
Обща енергия, оптимизация на геометрията и ЯМР на бензол в рамките на ТФП(V3LYP).

Тема / Модул 5: Методи за молекулярно моделиране IV. Преходни състояния и термодинамика

- ППЕ(PES). Екстремни точки(локални минимуми и максими),
- Търсене на състоянието на прехода.
- Методи за намиране на преходни структури
- Изомери - енергии на формиране и реакции

Термодинамика на идеалния газ

- Идеален и истински газ
- Сума на състоянията и химични потенциали.
- Свободна енергия на Гибс.
- Стабилност на системата и химически реакции

Упражнение: Практическа сесия 5: Протонов трансфер в малоналдеhid Енол (B88-LYP / DZVP).
Diels-Alder - trans-бутадиен и етилен (PM3). Моделиране на други на реакции.

Тема / Модул 6: Практическо молекулярно моделиране с помощта на инсталирани помощни програми и набори от програми за инсталиране на молекулярно моделиране. Методи

- Молекулярна механика. Полуемпирични методи (Mopac).Hartree-Fock и пост-ХФ.
- Функционална теория за плътността.
- Избор на теоретичен метод
- Базови функции - използване на налични базови функции
- Молекулна енергия за определена геометрия и оптимизиране на геометрия на молекули
- Молекулярни орбитали и плътности.

Упражнение: Практическа сесия 6: Общо изчисление на енергията и оптимизиране на молекули в рамките на HF и DFT апроксимации. Молекулни диаграми, графично представяне на молекулни диаграми, орбитали и плътности.

Форми на обучение и оценяване:

Редовна и задочна форма на обучение.

Компетентности, придобити в резултат на обучението (3-5 точки):

1. Придобиване на базови познания в квантовохимичните методи.
2. Получаване на знания за използване на метод на Хартри-Фок
3. Получаване на знания за теорията на функционала на плътността.
4. Придобиване на знания за електронно изчисляване на структурата и методите за симулация на молекулярната динамика с приложения в материалознанието.

Литература:



ЦЕНТЪР ЗА ОБУЧЕНИЕ – БАН

1000 София
ул. „Сердика“ № 4
<http://edu.bas.bg>

email: tdc-phd@cu.bas.bg
тел.: 02 987 31 67
02 979 52 60

-
1. Introduction to Quantum Mechanics, David J. Griffiths, Cambridge University Press, 978-1-316-64651-9, 2017
 2. The Physics of Quantum Mechanics, James Binney & David Skinner, J Binney, ISBN. 9780199688579, 2008
 3. Квантова химия, Н. Тютюлков, Наука и изкуство, София, 1978 г.

Допълнителна информация (по желание) (например: специални изисквания, лабораторно оборудване, предварителни знания):

.....
.....
.....