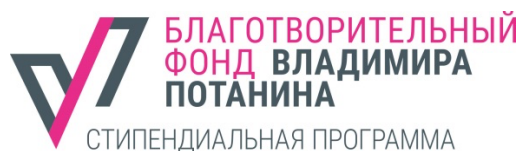


УДК 541.1(075)
ББК Г511.2я7
Р69

*Печатается по решению редакционно-издательского совета
Казанского национального исследовательского технологического университета*



*Учебное пособие подготовлено в рамках проекта, реализуемого победителем
конкурса на предоставление грантов преподавателям магистратуры
благотворительной программы «Стипендиальная программа Владимира
Потанина» Благотворительного фонда Владимира Потанина 2020/2021*

Рецензенты:

*д-р хим. наук, проф. Я. А. Верецагина
канд. физ.-мат. наук В. С. Лобков*

Романова К. А.

Р69 Квантово-химическое моделирование физико-химических свойств химических соединений : учебное пособие / К. А. Романова, Ю. Г. Галяметдинов; Минобрнауки России, Казан. нац. исслед. технол. ун-т. — Казань : Изд-во КНИТУ, 2021. — 84 с.

ISBN 978-5-7882-3054-2

Рассмотрены особенности теоретических методов исследования в химии, основные квантово-химические подходы и методы. Приведены примеры квантово-химического моделирования молекулярного строения и некоторых физико-химических свойств химических соединений.

Предназначено для бакалавров и магистров химико-технологических направлений подготовки, также может использоваться аспирантами, обучающимися по направлению «Химические науки» (направленность «Физическая химия»).

Подготовлено на кафедре физической и коллоидной химии.

**УДК 541.1(075)
ББК Г511.2я7**

ISBN 978-5-7882-3054-2

© Романова К. А., Галяметдинов Ю. Г., 2021
© Казанский национальный исследовательский
технологический университет, 2021

СОДЕРЖАНИЕ

СПИСОК УСЛОВНЫХ ОБОЗНАЧЕНИЙ	4
ВВЕДЕНИЕ.....	8
1. ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ В ХИМИИ	9
1.1. Молекулярное моделирование в химии	9
1.2. Квантово-химические подходы и методы.....	10
1.2.1. Молекулярная механика и молекулярная динамика	16
1.2.2. Полуэмпирические методы	27
1.2.3. Неэмпирические методы.....	34
1.2.4. Теория функционала плотности	46
1.2.5. Базисные наборы	52
2. МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРОЕНИЯ И ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ СОЕДИНЕНИЙ.....	55
2.1. Оптимизация геометрии молекулы	55
2.2. Моделирование колебательных частот	59
2.3. Учет влияния растворителя	63
2.4. Моделирование возбужденных состояний	68
2.5. Подходы к моделированию материалов.....	78
БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК	81