

RTU studiju kurss "Kvantu ķīmija"

32000 Dabaszinātņu un tehnoloģiju fakultāte

Vispārējā informācija

Kods	ĶVĶ730
Nosaukums	Kvantu ķīmija
Studiju kursa statuss programmā	Obligātais/Ierobežotās izvēles
Atbildīgais mācītbspēks	Kaspars Traskovskis - Doktors, Asociētais profesors
Apjoms daļās un kredītpunktos	1 daļa, 3.0 kredītpunkti
Studiju kursa īstenošanas valodas	LV, EN
Anotācija	Studiju kurss rada padziļinātu izpratni par kvantu ķīmiskajiem aprēķiniem un ķīmisko savienojumu aprēķinu metodēm. Studējošais iegūst zināšanas par molekulāro mehāniku un kvantu ķīmiju, ķīmiskajām saitēm un to kārtām, elektronu sistēmu aprēķinu metodēm un programmām, padziļināti par Hīkeļa MO metodi, elektronu blīvumu, dipolmomentiem, orbitālēm, to tipiem un enerģijām, ķīmisko reakciju aprēķiniem, potenciālās enerģijas virsmām un ierosinātiem stāvokļiem. Mācību darbs ir orientēts uz zināšanu pielietošanu praktiskajos darbos veicot kvantu ķīmijas aprēķinus, izpratnes veicināšanu par dažādu aprēķinu rezultātu atšķirībām un pielietojumu organiskās ķīmijas praktiskās problēmu risināšanā.
Mērķis un uzdevumi, izteikti kompetencēs un prasmēs	Studiju kursa mērķis ir attīstīt prasmes pielietot kvantu ķīmijas pieeju un izvēlēties piemērotas aprēķinu metodes kādu ķīmisko, sintētisko un spektroskopisko problēmu risināšanai. Studiju kursa uzdevumi ir: 1. Sniegt zināšanas par kvantu ķīmiskajiem aprēķiniem. 2. Attīstīt prasmi izvēlēties atbilstošu aprēķinu shēmu un metodiku. 3. Attīstīt prasmi patstāvīgi apstrādāt aprēķinu rezultātus un tos izvērtēt.
Patstāvīgais darbs, tā organizācija un uzdevumi	Students patstāvīgi veic praktiskajos darbos iegūto kvantu ķīmijas aprēķinu rezultātu apstrādi un iegūto datu interpretāciju, noformē laboratorijas darbu protokolus un apgūst teorētisko daļu.
Literatūra	Obligātā/Obligatory: 1. Lewars E.G. Computational Chemistry Introduction to the Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics, Springer, 2016, 728 p. 2. Lowe J.P., Peterson K.A. Quantum Chemistry. Third Edition. Elsevier, 2006, 726 p. 3. McQuarrie D.A. Quantum Chemistry. Second Edition. Sausalito: University Science Books, 2008, 704 p. 4. Степанов Н.Ф. Квантовая механика и квантовая химия, М: Мир, 2001 (In russian). 5. Кларк Т. Компьютерная химия. М: Мир., 1990, 384 с. (In russian). Papildu/Additional: 1. Traven V.F. Frontier orbitals and properties of organic molecules Ellis Horwood: London, 1992. - 401 p. 2. Wang Y.A., Thachuk M., Krems R., Maruani J. Concepts, Methods and Applications of Quantum Systems in Chemistry and Physics, Vol. 31, Cham: Springer, 2018, 407 p. 3. Tsuneda T. Density Functional Theory in Quantum Chemistry, Tokyo: Springer, 2014, 200 p. 4. Стрейтвизер Э. Теория молекулярных орбит для химиков-органиков. М: Мир., 1965, 465с. (In russian). 5. Буркерт У., Эллинджер Н. Молекулярная механика. Пер.с англ. М: Мир., 1986, 364 с. (In russian). 6. Травень В.Ф. Электронная структура и свойства органических молекул. М.: Химия, 1989, 389 с. (In russian)
Nepieciešamās priekšzināšanas	Zināšanas organiskajā ķīmijā, vielas uzbūvē un nomenklatūrā

Studiju kursa saturs

Saturs	Pilna un nepilna laika klātienēs studijas		Nepilna laika neklātienēs studijas	
	Kontakt stundas	Patstāv. darbs	Kontakt stundas	Patstāv. darbs
Ievads kvantu ķīmijā. Molekulu modeļi. Molekulu ģeometrija, saišu garumi un leņķi starp saitēm. Molekulu ģeometrijas noteikšanas metodes. Atomu anharmoniskās svārstības molekulā, svārstību amplitūda.	1	0	0	0
Iepazīšanās ar programmu paketi "Hyperchem"	2	1	0	0
Ķīmisko savienojumu aprēķinu metodes. Molekulārā mehānika un kvantu ķīmija. Šredingera vienādojuma atrisināšanas iespējas.	1	6	0	0
Sistēmas viļņu funkcija. Borna-Openheimera tuvinājums. Enerģijas diskrētums absorbcijas un emisijas procesos.	1	0	0	0
Bora atoma modelis, elektronu stacionārās orbītas. Orbitālie kvantu skaitļi, magnētiskie kvantu skaitļi, spini. Viļņu mehānika. Šredingera vienādojums.	1	0	0	0
Jēdziens par operatoriem, Laplasa un Hamiltona operatori. Viļņu funkcija, tās fizikālā jēga. Viļņu funkciju īpašības, to normējošais faktors.	1	0	0	0
Telpiskās viļņu funkcijas sadalīšana lineārās funkcijās. Orbitāles, to tipi un enerģijas. Atomfunkcijas un atomorbitāles.	1	1	0	0
Molekulāro orbitāļu veidošanās no atomārajām orbitālēm. Divcentru sistēmas. Viļņu funkcijas divcentru sistēmai.	1	0	0	0

Variāciju metode. Heitlera-Londona tuvinājums. Hunda tuvinājums. MO metode divcentru sistēmai.	1	0	0	0
Īpašfunkcijas un īpašvektori. Atomāro orbitāļu pārklāšanās, pārklāšanās nosacījumi.	1	0	0	0
MO metožu iedalījums. Neempīriskās metodes. Bāzes funkcijas. Sleitera tipa funkcijas. Gausa tipa funkcijas.	1	1	0	0
Rutana vienādojums, tā risināšanas shēmas. Iterāciju shēma. Rutana metodes precizitāte. Bāzes funkciju izmantošana un to ietekme uz rezultātiem.	1	0	0	0
Pusempīriskās metodes, to veidošanas principi. LKAO MO Rutana tuvinājums Hartri-Foka vienādojumiem. Nulles diferenciālās pārklāšanās tuvinājums (NDO).	1	0	0	0
Pusempīrisko metožu iedalījums. SCF metodes. NDDO, MNDO, MNDOC, AM1, PM3, PM6 versijas. INDO, MINDO, MINDO/3 versijas. CNDO, CNDO/2, CNDO/S, ZINDO/S versijas.	1	2	0	0
MO aprēķini ar Hikeļa metodi.	1	2	0	0
Saišu enerģijas, saišu kārtas, saišu garumi, konjugācija un hiperkonjugācija.	1	6	0	0
Dažādu savienojumu aprēķini ar Hikeļa metodi.	2	6	0	0
Lādiņa blīvuma sadalījums molekulā. Lokalizētas un delokalizētas MO. Degenerētas MO.	1	2	0	0
Frontālās MO (FMO). FMO teorijas pielietojums. MO perturbāciju teorija, tās pielietojums.	1	2	0	0
Ķīmisko reakciju aprēķini. Potenciālās enerģijas virsmas, globālie un lokālie minimumi, konformāciju maiņa, aktivācijas enerģija, reakciju virzieni.	1	1	0	0
Fotoķīmiskās reakcijas. Potenciālās enerģijas virsmas ierosinātam stāvoklim.	1	0	0	0
Molekulu elektrononoro un elektronakceptoru īpašību novērtējums. Jonizācijas potenciāls. Kupmana teorēma. Fotoelektronu spektroskopija.	1	2	0	0
Molekulu ierosinātie stāvokļi. Ierosināto stāvokļu daba. Franka-Kondona princips. Singleta un tripleta stāvokļi. Ekstinkcijas koeficients un pārejas moments.	1	1	0	0
Ierosināto stāvokļu veidošanās un deaktivācijas ceļi. Ierosinātā stāvokļa stabilitāte.	1	1	0	0
Lineārie un nelineārie optiskie efekti. Atkāpes no Bugēra-Lamberta-Bēra likuma. Mikroskopiskā un makroskopiskā optiskās uzņēmības raksturošana.	1	0	0	0
Molekulu vibrāciju un NMR ķīmisko nobīžu aprēķini. Rezultātu ticamība.	1	2	0	0
RHF un UHF aprēķinu shēmu pielietošana.	1	2	0	0
Dažādu savienojumu aprēķini ar pusempīriskajām metodēm.	3	10	0	0
Kopā:	32	48	0	0

Sasniedzamie studiju rezultāti un to vērtēšana

Sasniedzamie studiju rezultāti	Rezultātu vērtēšanas metodes
Izprot molekulāro mehāniku, elektronu sistēmas, ķīmisko saiti, elektronu blīvumu, molekulārās orbitāles un to aprēķinus.	Pārbaudes forma: praktiskie darbi, eksāmens. Kritēriji: prot izskaidrot struktūru kvantu ķīmisko aprēķinu rezultātus.
Spēj novērtēt vienas vai citas pielietotas kvantu ķīmijas aprēķinu metodikas ietekmi uz rezultātiem.	Pārbaudes forma: praktiskie darbi, eksāmens. Kritēriji: novērtē zinātnisko publikāciju datus un prot salīdzināt ar praktiskajos darbos iegūtajiem.
Pārzina dažādas kvantu ķīmijas aprēķinu programmas.	Pārbaudes forma: praktiskie darbi. Kritēriji: spēj izvēlēties piemērotu kvantu ķīmijas aprēķinu metodi konkrētā uzdevuma veikšanai.
Prot pielietot kvantu ķīmijas programmas molekulas struktūras aprēķinu veikšanai.	Pārbaudes forma: praktiskie darbi, eksāmens. Kritēriji: spēj veikt prasītos aprēķinus nejauši izvēlētai struktūrai.

Studiju rezultātu vērtēšanas kritēriji

Kritērijs	% no kopējā vērtējuma
Praktiskie darbi	50
Eksāmena vērtējums	50
Kopā:	100

Studiju kursa plānojums

Daļa	KP	Stundas			Pārbaudījumi		
		Lekcijas	Prakt d.	Laborat	Ieskaite	Eksām.	Darbs
1.	3.0	1.0	1.0	0.0		*	