

«Утверждаю»

Ректор РХТУ им. Д.И. Менделеева

_____ В.А. Колесников

« _____ » _____ 2010

г.

УЧЕБНАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

«Компьютерное моделирование наноразмерных систем»

для опережающей профессиональной переподготовки, ориентированных на инвестиционные проекты ГК «РоснаноТех» в области организации конкурентоспособного высокотехнологичного отечественного производства модифицированных слоистых наносиликатов, мастербатчей (прекурсоров нанокompозитов) и полимерных нанокompозиционных материалов нового поколения в Брянской области

Разработчик программы:

Доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой квантовой химии Цирельсон В.Г.

Москва 2010

1. ПОЯСНИТЕЛЬНАЯ ЗАПИСКА

Курс “Компьютерное моделирование наноразмерных систем” является составной частью программы переподготовки специалистов. Задача курса – обучение методам моделирования наноструктур - молекулярных и супрамолекулярных систем, кластеров и кристаллов, принципам алгоритмизации задач, умению проводить поиск в базах структурных, термодинамических данных и самостоятельно выполнять расчеты с использованием современных компьютерных программных комплексов.

В результате изучения курса выпускник должен:

Знать:

- основные положения современной теории химической связи, межмолекулярного взаимодействия и реакционной способности веществ и примеры ее применения к конкретным наноразмерным системам;
- принципы количественной характеристики атомной и электронной структуры молекулярных, супрамолекулярных и кристаллических наносистем и полимеров;
- основные взаимосвязи между электронной структурой и физико-химическими свойствами веществ, лежащие в основе управления свойствами;
- возможности основных современных методов компьютерного моделирования, области их применимости и методы трактовки химических явлений и процессов в наношкале.

Уметь:

Применять современные методы компьютерного моделирования для расчета, интерпретации и предсказания строения и физико-химических свойств молекулярных, супрамолекулярных и кристаллических наносистем.

Владеть:

Навыками применения современных методов компьютерного моделирования при решении практических задач и стандартными компьютерными программами, применяемыми для этой цели.

2. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

2.1. Разделы дисциплины и виды занятий

№ п/п	Раздел курса	Лекции, ч	Практические занятия, ч	Самостоятельная работа, ч
	Современное состояние теоретических подходов к моделированию наноразмерных систем. Механическая модель молекулы	2	2	2
	Неэмпирические методы расчета строения и свойств наноразмерных систем Полуэмпирические модели наносистем Методы молекулярной динамики в моделировании нанообъектов	6	2	2
	Описание валентных взаимодействий в наносистемах Моделирование	6	2	4

	<p>нековалентных взаимодействий в супрамолекулярных системах и наноструктурах. Модели образования наноструктур</p>			
	<p>Стандартные методы моделирования физических, химических и биологических процессов в наносистемах Моделирование периодических атомных и молекулярных систем. Моделирование структуры биологических систем</p>	4	2	2
	<p>Компьютерная реализация моделирования наносистем. Использование термодинамических, структурных и других баз данных для создания моделей наносистем Обзор результатов компьютерного моделирования некоторых наноразмерных систем.</p>	2		2
	Итого:	10	8	12

2.2. Содержание разделов дисциплины.

1. Современное состояние теоретических подходов к моделированию наноразмерных систем.

Возможности нанонауки и нанотехнологий: теоретический аспект. Цели моделирования. Физико-химические модели структуры нанообъектов. Классификация методов моделирования строения молекул, супрамолекулярных систем, кластеров, полимеров, кристаллов, наноструктур. Использование структурных, спектроскопических и термодинамических данных для построения начальных моделей. Межчастичное взаимодействие. Парные и трехчастичные потенциалы.

2. Механическая модель молекулы.

Силовые поля и их параметры. Энергия: растяжения связи, угловой деформации, кручения. Алгоритмы молекулярной механики. Параметризация классических силовых полей. Компьютерная реализация моделирования молекул, супрамолекулярных систем, кластеров, полимеров и наноструктур методами молекулярной механики. Практические приложения и ограничения методов.

3. Неэмпирические методы расчета строения и свойств молекул и кластеров.

Свойства электронной волновой функции. Приближение Борна-Оппенгеймера. Методы Хартри-Фока и Кона-Шэма.

Электронная корреляция и методы. Метод конфигурационного взаимодействия. Теория возмущений. Метод связанных кластеров.

Иерархия методов квантовой химии. Базисные функции для неэмпирических расчетов. Номенклатура базисных наборов. Роль базисных функций в описании свойств наносистем. Точность неэмпирических квантово-химических расчетов. Компьютерная реализация неэмпирического моделирования наносистем.

4. Полуэмпирические модели наносистем.

Методы, основанные на пренебрежении дифференциальным перекрыванием.

Методы, использующие π -электронное приближение. Точность полуэмпирических квантово-химических расчетов. Полуэмпирические методы для расчета наносистем. Компьютерная реализация полуэмпирического моделирования наносистем.

5. Методы молекулярной динамики в моделировании нанообъектов.

Методы молекулярной динамики и статической релаксации. Алгоритмы расчетов. Стандартные программы и их характеристики.

6. Описание валентных взаимодействий в наносистемах.

Орбитальная картина химической связи. Конструктивная и деструктивная интерференция орбиталей. Молекулярные орбитали и их характеристики. Анализ заселенностей атомных орбиталей.

Пространственное распределение электронной плотности. Деформационная электронная плотность. Квантово-топологическая теория химической связи.

Электростатический и энергетический аспекты описания химической связи. Теорема Гельмана-Фейнмана. Теорема вириала. Локализация и гибридизация орбиталей. Модели электронной локализации и их орбитальное и квантово-топологическое обоснование.

7. Моделирование нековалентных взаимодействий в супрамолекулярных системах и наноструктурах. Модели образования наноструктур.

Потенциалы атомных и молекулярных взаимодействий. Водородная связь. Ван-дер-ваальсово взаимодействие. Понятие о супрамолекулярной химии. Иерархия построения супрамолекулярных систем.

8. Стандартные методы моделирования физических, химических и биологических процессов в наносистемах.

Квантово-химическое описание химических реакций. Поверхность потенциальной энергии химической реакции. Методы описания химических реакций.

Индексы реакционной способности. Электростатический потенциал. Взаимодействие атомов и молекул с поверхностью.

9. Моделирование периодических атомных и молекулярных систем.

Одноэлектронные волновые функции периодических структур и методы их расчета. Приближение локальной плотности. Уровень Ферми. Плотность состояний. Зонная структура и свойства твердых тел. Кластерное приближение. Электронное строение периодических наноструктур.

10. Моделирование структуры биологических систем.

Взаимодействия хозяин-гость (субстрат-рецептор). Молекулярное распознавание. Активные фрагменты и их роль при создании наноразмерных биоструктур. Теоретическое конструирование макромолекул.

11. Компьютерная реализация моделирования наносистем.

Использование структурных, спектральных и термодинамических баз данных для создания Подготовка данных, расчет и интерпретация результатов неэмпирических и полуэмпирических расчетов. Программы неэмпирических и полуэмпирических квантово-химических расчетов.

Кембриджская база структурных данных: базы ИВТАН-термо и Fact. Принципы поиска и обработки структурных данных. Визуализация внутри- и межмолекулярных контактов.

12. Обзор результатов компьютерного моделирования некоторых наноразмерных систем.

Свойства фуллеренов и их аналогов, молекулярная электроника, позиционно-контролируемый механохимический синтез, взаимодействия в супрамолекулярных наносистемах.

3. ПРАКТИЧЕСКИЕ (СЕМИНАРСКИЕ) ЗАНЯТИЯ

Семинарские занятия

1. Приближение Борна-Оппенгеймера. Молекулярная структура. Конформации молекул.
2. Орбитальные модели применительно к наноразмерным системам.

Практические (компьютерные) занятия

1. Построение моделей молекулярных систем методами молекулярной механики.
2. Компьютерное моделирование неэмпирическими методами.
3. Компьютерное моделирование полуэмпирическими методами
4. Поиск структурной информации в Кембриджском банке структурных данных и их обработка.

4. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

4.1. Рекомендуемая литература.

А) Основная литература:

1. В.Г. Цирельсон. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела. М.: Академкнига, 2009.- 500 с.
2. М.В. Венер, В.Г. Цирельсон. Моделирование супрамолекулярных систем и наноструктур. М.: РХТУ, 2008. - 132с.

3. В.Г. Цирельсон, М.Ф.Бобров. Многоэлектронный атом. М.: РХТУ, 2004.- 51с.
4. В.Г. Цирельсон, М.Ф.Бобров. Квантовая химия молекул. М.: РХТУ, 2000.- 83с.
5. Е.С. Апостолова, А.И. Михайлюк, В.Г. Цирельсон. Квантово-химическое описание реакций. М.: РХТУ, 1999. - 61с.
6. В.Г. Цирельсон. Химическая связь и межмолекулярное взаимодействие. М.: РХТУ, 2004.- 108с.
7. В.И. Минкин, Б.Я. Симкин, Р.М. Миняев. Теория строения молекул. Ростов: Феникс, 1997. - 560 с.
8. М.Е. Соловьев, М. М. Соловьев. Компьютерная химия. М.: СОЛОН-Пресс, 2005. - 536 с.
9. Романова Т.А., Краснов П.О., Качин С.В., Аврамов П.В. Теория и практика компьютерного моделирования нанообъектов // Мультимедийное справочное пособие. - Красноярск: ИПЦ КТГУ. 2002. - 223 с.
10. Дж.В. Сид, Дж.Л. Этвуд. Супрамолекулярная химия. В 2-х томах. М: Академкнига. 2007.

Б) Дополнительная литература:

1. В.Г. Цирельсон. Химическая связь и тепловое движение атомов в кристаллах. -М.: ВИНТИ, 1993. - 262 с.
2. R.W. Atkins. Molecular Quantum Mechanics. Sec.Ed. Oxford:Oxford Univ. Press.- 1990. -471p.