



1. PREDMET: OSNOVE MOLEKULSKEGA MODELIRANJA

Šifra: 30-2025

Število kreditnih točk (ECTS): 12

Obseg ur: 60, predavanja 30, seminarji 30

Program: podiplomski študij – smer Kemija

2. VZGOJNOIZOBRAŽEVALNI CILJI

Modeliranje s pomočjo računalnika se danes uspešno uporablja na mnogih področjih znanosti in tehnike, zelo intenzivno tudi v kemiji. Namen predmeta je seznaniti podiplomske študente kemije in sorodnih smeri z osnovami modeliranja različnih molekulskih sistemov. Prvi del je zaradi predvidenega različnega predznanja študentov namenjen ponovitvi osnov kvantne mehanike ter fizike atomov in molekul. V osrednjem delu predavanj se študentje seznanijo z metodami, objekti in cilji molekulskega modeliranja. V sklepu pa je podan pregled aktualnih računalniških metod in programov s posebnim poudarkom na grafični predstavitvi modeliranja, združen s praktičnim delom na različnih računalnikih. Znanje, pridobljeno pri predmetu, naj bi dalo slušateljem pregled nad možnostmi, ki jih nudi molekulska modeliranje, sposobnost kritičnega ovrednotenja dobljenih rezultatov ter jim omogočilo relativno samostojno delo s pomočjo vedno večjega obsega programske opreme, ki se v svetu pojavlja.

3. VSEBINA

Ponovitev osnov kvantne mehanike ter fizike atomov in molekul (Schrödingerjev in Heisenbergov pristop, Schrödingerjeva enačba, Paulijev izključitveni princip, Heisenbergovo pravilo nedoločljivosti). Opis in reševanje modelnih primerov: delec in pregrade, togi rotator, harmonski oscilator, vodikov atom. Metode za približno računanje: variacijska metoda in metoda motenj. Modeli za obravnavanje atomskih in molekulskih sistemov: teorija valenčnih vezi in teorija molekulskih orbital, Hartree-Fockov model.

Pregled metod, sistemov in ciljev modeliranja. Elektronska struktura: Hartree-Fock (ab initio, semiempirične metode), gostotni funkcionali. Uporaba efektivnih potencialov (molekularna mehanika, molekularna dinamika, Monte Carlo). Pomen in uporaba grafike pri modeliranju.

Skupine sistemov, primerne za modeliranje: manjše molekule v vakuumu, vpliv okolice, interakcije med molekulami, modeliranje kemijskih reakcij (prehodna stanja), pomoč eksperimentalnim rezultatom z metodo modeliranja.

Cilji modeliranja: poznavanje elektronske strukture in geometrije molekul (iz osnovnih podatkov), napoved lastnosti molekul in njihova povezava s strukturo, podobnost molekul, možnost načrtovanja molekul z vnaprej določenimi želenimi lastnostmi. Vloga računalniške grafike pri molekulskega modeliranju. Pregled najbolj znanih računalniških programov za uporabo pri modeliranju (Gaussian, Spartan, HyperChem ...), prikaz praktičnega dela na

osebнем računalniku, delovni postaji in velikem računalniku (preko računalniške mreže). Sistematični pregled celotne snovi.

4. POVEZANOST Z DRUGIMI PREDMETI

Predmet je osnovan na matematiki in klasični fiziki, povezan pa je s kvantno in fizikalno kemijo ter predmetom Struktura atomov in molekul.

5. ŠTUDIJSKA LITERATURA

OSNOVNI UČBENIKI:

- Hehre, W. J. et al. *Ab initio Molecular Orbital Theory*. New York: John Wiley, 1986.
- Sadley, J. *Semi-Empirical Methods in Quantum Chemistry*. Chichester: Ellis Horwood, 1985.
- Priročniki za uporabo računalniških programov.

DODATNA LITERATURA:

- Koller, J. *Struktura atomov in molekul, Osnove kvantne mehanike, atomi*. Ljubljana: FKKT, 2002.
- Koller, J. *Struktura atomov in molekul: Molekule, osnove spektroskopije*, Ljubljana: FKKT, 2000.

6. OBVEZNOSTI ŠTUDENTA

Seminarji, ustni izpit.

PRIPRAVIL: Jože Koller

DATUM: 18. 7. 2003