

УДК 661.7.001.5(075)  
ББК 35.50я7  
С21

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

*Рецензенты:*  
канд. хим. наук, ст. науч. сотр. Р. З. Мусин  
канд. техн. наук, доц. Г. Ш. Зиганишин

- С21 Сафиулина А. Г.**  
Теоретические методы исследования продуктов органического синтеза : учебное пособие / А. Г. Сафиулина, Р. Г. Тагашева; Мин-обнауки России, Казан. нац. исслед. технол. ун-т. – Казань : Изд-во КНИТУ, 2018. – 88 с.

ISBN 978-5-7882-2406-0

Представлен обзор современных теоретических методов исследования и применяемых в настоящее время пакетов прикладных программ для выполнения квантовохимических расчетов и визуализации результатов моделирования и оптимизации.

Предназначено для магистров очной формы обучения по направлению подготовки 18.04.01 «Химическая технология», изучающих дисциплину «Теоретические и экспериментальные методы исследования в химии».

Подготовлено на кафедре «Технология основного органического и нефтехимического синтеза».

**УДК 661.7.001.5(075)  
ББК 35.50я7**

ISBN 978-5-7882-2406-0

© Сафиулина А. Г., Тагашева Р. Г., 2018  
© Казанский национальный исследовательский  
технологический университет, 2018

## СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ .....	3
1. МОЛЕКУЛЯРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ.....	5
1.1 Молекулярная механика .....	5
1.2 Молекулярная динамика.....	10
1.3 Метод Монте-Карло .....	12
2. КВАНТОВОХИМИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ.....	14
2.1 Основы квантовой механики и химии. Основные положения .....	14
2.2 Основные приближения квантовой химии .....	16
2.3 Современные полуэмпирические методы расчета .....	28
2.4 Общая характеристика неэмпирических квантовохимических методов расчета.....	44
2.5 Методы, основанные на методе возмущений .....	47
2.6 Метод связанных кластеров .....	51
2.7 Теория функционала плотности .....	54
2.8 Топологические методы квантовой химии .....	68
3. СОВРЕМЕННОЕ ПРОГРАМНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ .....	71
3.1 Программы для квантовохимических расчетов.....	71
3.2 Программы-интерпретаторы .....	75
3.3 Алгоритм работы программы .....	80
СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ .....	85