

УДК 544.43:544.18

Цышевский Р.В.

Квантово-химические расчеты механизмов химических реакций : учебно-методическое пособие / Р.В. Цышевский, Г.Г. Гарифзянова, Г.М. Храпковский; М-во образ. и науки России, Казан. нац. исслед. технол. ун-т. – Казань: Изд-во КНИТУ, 2012. – 88 с.

ISBN 978-5-7882-1301-9

Приведены лабораторные работы по изучению механизмов химических реакций с использованием современных квантово-химических методов.

Предназначено для студентов очной, очно-заочной форм обучения химико-технологических направлений, изучающих дисциплину «Катализ и механизмы химических реакций».

Подготовлено на кафедре катализа.

Рецензенты: д-р хим. наук, проф. *В.И. Коваленко*
д-р хим. наук, проф. *А.М. Кузнецов*
д-р хим. наук, проф. *Ю.Д. Орлов*

ISBN 978-5-7882-1301-9 © Цышевский Р.В., Гарифзянова Г.Г.,
Храпковский Г.М., 2012
© Казанский национальный исследовательский
технологический университет, 2012

Введение

В последние годы методы квантовой химии существенно расширили область своего применения. Еще сравнительно недавно, 25-30 лет тому назад, полуэмпирические квантово-химические методы использовались преимущественно для изучения молекулярной структуры, интерпретации результатов эксперимента, исследования корреляционных зависимостей параметров геометрической и электронной структуры органических соединений с их реакционной способностью, то в настоящее время в связи с развитием средств вычислительной техники и совершенствованием неэмпирических методов стало возможным количественное изучение механизмов сложных многостадийных реакций, в том числе и каталитических процессов.

Сегодня можно констатировать, что квантово-химические методы стали важнейшим инструментом химического исследования; их результаты можно найти практически в любой статье, посвященной вопросам теоретической и прикладной химии. Существенно, что с каждым годом роль теоретических методов исследования непрерывно возрастает. Подобная тенденция прослеживается и при анализе присуждения Нобелевских премий по химии. Среди лауреатов Нобелевской премии по химии можно найти, таких выдающихся ученых, внесших значительный вклад в создание и развитие методов квантовой химии как Л. Полинг, Р. Малликен, Р. Хоффман, Р. Фукуи. В 1998 г. Нобелевская премия по химии была присуждена Джону Поплу (за разработку вычислительных методов квантовой химии) и Вальтеру Кону (за развитие теории функционала плотности).

Знакомство с теоретическими основами и практическими аспектами использования квантово-химических методов безусловно необходимо химикам-технологам различных специальностей. В нашей стране в последние годы опубликован ряд учебников для химиков [1-7]. Наиболее удачным из них является книга профессора Цирельсона [1]. К сожалению, опубликованные работы из-за большого объема и значительного времени, необходимого для их освоения, малопригодны для первоначального ознакомления с предметом. В Казанском национальном исследовательском технологическом университете изучению квантово-химических методов уделяется значительное внимание. Эта важная и сложная задача решается в различных общих и специальных курсах. Так, например, на

протяжении многих лет сотрудниками кафедры неорганической химии читается курс квантовой химии и квантовой механики для будущих магистров различных специальностей. По материалам этих курсов подготовлено несколько учебных пособий [8, 9], в которых рассматриваются теоретические вопросы квантовой механики и квантовой химии, а также практические аспекты проведения квантово-химических расчетов.

На кафедре катализа КНИТУ для химиков-технологов различных специальностей читается курс «Катализ и механизмы химических реакций», одной из задач которого является получение студентами практических навыков проведения расчетов элементарных стадий многостадийных химических реакций, в том числе и каталитических процессов.

Опыт проведения практических занятий по данному курсу показал необходимость подготовки нескольких учебных и учебно-методических пособий, которые помогли бы студентам освоить новый для них и достаточно сложный материал.

Использование современных компьютеров позволяет проводить квантово-химические исследования за относительно небольшое время. Таким образом, за одно практическое занятие можно исследовать несколько различных механизмов, получить оценки величин энергии активации, константы скорости и предэкспоненциального множителя. В свою очередь использование программ визуализаторов позволяет студентам

- получить данные по геометрии реагентов, продуктов и переходного состояния реакции;
- проследить за изменениями, которые протекают в молекулярной структуре в процессе химической реакции;

В настоящем учебно-методическом пособии основное внимание уделяется методике проведения лабораторных работ по изучению механизмов химических реакций методами квантовой химии. Более подробное рассмотрение различных аспектов теоретического изучения механизмов химических реакций будет осуществлено в учебном пособии, которое в настоящее время готовится сотрудниками нашей кафедры и будет опубликовано позже.