

**МИНОБРНАУКИ РОССИИ  
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ  
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ  
ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
«БАШКИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ПЕДАГОГИЧЕСКИЙ  
УНИВЕРСИТЕТ ИМ.М.АКМУЛЛЫ»**

**ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ**

**Кафедра прикладной физики и нанотехнологий**

**Направление 110304 - Электроника и наноэлектроника**

**2 курс бакалавриата**

**БАКИЕВ АРТУР ФАЙЗРАХМАНОВИЧ**

## **ОГРАНИЧЕННЫЙ МЕТОД ХАРТРИ-ФОКА**

**КУРСОВАЯ РАБОТА**

**по дисциплине «Методы математического моделирования физических объектов»**

**Научный руководитель: старший преподаватель Г.Ш. Байбулова**

# **СОДЕРЖАНИЕ**

**1. Моделирование как метод  
научного исследования**

**2. Ограниченный метод Хартри –  
Фока**





- \* Дуглас Рэйнер Хартри (англ. Douglas Rayner Hartree; 27 марта 1897, Кембридж — 12 февраля 1958, Кембридж) — английский физик-теоретик и математик. Член Лондонского королевского общества (1932). Работы Хартри в области физики посвящены в основном квантовой теории и атомной физике. Он также известен своей деятельностью в области создания и обслуживания вычислительных систем, являясь одним из пионеров вычислительной техники в Великобритании.

- \* **Владимир Александрович Фок (1898—1974) — советский физик. Академик АН СССР (1939; член-корреспондент с 1932 года). Герой Социалистического Труда. Член ряда академий наук и научных обществ. Удостоен многих национальных и международных наград**



Метод Хартри - Фока является основным расчетным методом квантовой химии.

Он представлен в различных вариантах:

- для систем с замкнутыми электронными оболочками
- открытыми электронными оболочками.

Во многих случаях он позволяет получить хорошие результаты для прогнозирования свойств молекулярных систем.

Метод позволяет рассчитывать полную энергию молекул с высокой точностью, которой все же недостаточно для расчета малых энергетических эффектов





**ПОЛУЭМПИРИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ** квантовой химии, методы расчета молекулярных характеристик или свойств вещества с привлечением экспериментальных данных. По своей сути полуэмпирические методы аналогичны неэмпирическим методам решения уравнения Шрёдингера для многоатомных мол. систем, однако для облегчения расчетов в полуэмпирических методах вводятся дополнит. упрощения. Как правило, эти упрощения связаны с валентным приближением, т. е. основаны на описании лишь валентных электронов, а также с пренебрежением определенными классами молекулярных интегралов в точных уравнениях того неэмпирического метода, в рамках которого проводится полуэмпирический расчет



Метод INDO занимает промежуточное по сложности и времени вычислений положение между методами NDDO и CNDO. Он преодолевает основной недостаток метода CNDO, в котором пренебрегается различием в кулоновском отталкивании электронов с параллельными и антипараллельными спинами. Это достигается за счет сохранения одноцентровых обменных интегралов ( $\mu A \nu A | \mu A \nu A$ ), но двухцентровые ( $\mu A \nu A | \mu B \nu B$ ) по-прежнему рассматриваются в рамках НДП как равные нулю. Как следствие, метод INDO лучше воспроизводит электронную структуру соединений с открытыми оболочками. Однако он неприменим для расчета энергетических характеристик молекулы и, следовательно, для построения ППЭ и изучения механизмов реакций



Метод MNDO. В методе MNDO (Modified Neglect of Diatomic Overlap, МПДП) учитываются интегралы межэлектронного отталкивания, включающие одноцентровые перекрывания. Интегралы  $(\mu\mu|vv)$ ,  $\mu A$ ,  $v B$  рассчитываются, а не аппроксимируются. Важным преимуществом метода MNDO по сравнению с MINDO/3 является отказ от параметризации резонансного интеграла  $V_{\mu\nu}$  по связевому типу и переход к соотношению

$$H_{\mu\nu} = V_{\mu\nu} = S_{\mu\nu} \frac{1}{2} (V_{\mu} + V_{\nu}).$$

Метод AM1. С целью учета этих эффектов в параметризации AM1 (Austin Model) в выражении для Escore включены дополнительные члены, которые можно рассматривать как члены ван-дер-ваальсова отталкивания. В результате метод AM1 лучше воспроизводит водородную связь и дает лучшие результаты для активационных параметров, чем метод MNDO

Метод РМЗ. Метод РМЗ очень близок к методу АМ1, отличие состоит в том, что в методе РМЗ все параметры, аппроксимирующие интегралы взаимодействия, подбираются наилучшим образом (оптимизируются с помощью набора соединений с надежно измеренными экспериментальными свойствами), тогда как в АМ1 интегралы межэлектронного взаимодействия рассчитываются из экспериментальных спектроскопических данных для атомов

Математическое моделирование является методом научного исследования, основанным на познании химических процессов через математическую модель. Математическое моделирование включает две основные стадии составление математической модели и ее исследование. Моделирование — это исследование каких-либо явлений, процессов или систем объектов путем построения и изучения их моделей использование моделей для определения и уточнения характеристик и рационализации способов построения вновь конструируемых объектов. Моделирование — одна из основных категорий теории познания на идее моделирования, по существу, базируется любой метод научного исследования — как теоретический, так и экспериментальный.